

# ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

Теоретическая и прикладная  
физика

ВЫПУСК 3

2008

ФГУП

"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР – ВНИИЭФ"

# ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ

СЕРИЯ:

**Теоретическая и прикладная  
физика**

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ СБОРНИК

ВЫПУСК 3

Издается с 1984 г.

Саров – 2008

## **Уважаемые читатели!**

Редакция н/т сборника "Вопросы атомной науки и техники" серии "Теоретическая и прикладная физика" информирует о том, что начиная со 2-го полугодия 2008 г. журнал будет распространяться согласно новым правилам подписки.

Теперь подписаться на сборник можно во всех отделениях связи России по каталогу Агентства "Роспечать", раздел "Периодические издания НТИ", подписной индекс 72246.

Цена одного журнала – 200 руб.

В год издается 3 выпуска.

По всем вопросам обращаться по адресу:

*607190 г. Саров Нижегородской обл., пр. Мира, 37, РФЯЦ-ВНИИЭФ.*

*ИТМФ. Редакция журнала ВАНТ, сер. "Теоретическая и прикладная физика".*

Тел. (83130)7-54-96; e-mail: [kul@otd68.vniief.ru](mailto:kul@otd68.vniief.ru)

Главный редактор Ю. А. Трутнев

Редакционная коллегия:

Е. Н. Аврорин – зам. главного редактора, М. В. Горбатенко, В. П. Копышев, Н. В. Лычагина –  
ответственный секретарь, Б. А. Надыкто – зам. главного редактора, А. В. Певницкий,  
В. А. Симоненко, В. П. Соловьев, С. А. Холин

## ДИРАКОВСКАЯ ЧАСТИЦА В ГРАВИТАЦИОННОМ ПОЛЕ

М. В. Горбатенко, Т. М. Горбатенко

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Рассматривается движение дираковской частицы в гравитационном поле, описываемом решением Керра. Доказывается, что эволюция волновой функции определяется эрмитовым гамильтонианом, если используется сопутствующая система отсчета.

### 1. Введение

В последнее время появился ряд публикаций по вопросам, связанным с описанием движения дираковских частиц в гравитационных полях (см., например, [1–6]). Общая логика таких работ сводится к записи уравнения Дирака в форме уравнения Шредингера, доказательстве эрмитовости возникающего при этом оператора Гамильтона и анализе физических эффектов, вытекающих из полученного гамильтониана.

Такая логика представляется вполне естественной, однако на пути ее реализации имеется одно принципиальное препятствие. Препятствие обусловлено свободой выбора системы реперных векторов, используемых в уравнении Дирака и влияющих на физические эффекты. Поясним подробнее суть дела.

Уравнение Дирака для биспинора  $\psi$  имеет, как известно, следующий вид:

$$g^{\alpha\beta}\gamma_\alpha\left(\frac{\partial\psi}{\partial x^\beta} + \Phi_\beta\psi\right) - \frac{mc}{\hbar}\psi = 0. \quad (1)$$

Входящие в выражение (1) величины  $m$ ,  $c$ ,  $\hbar$  имеют обычный смысл: масса, скорость света и постоянная Планка соответственно. Греческие индексы обозначают векторные мировые индексы, которые принимают значения 0, 1, 2, 3. Принятая в рассмотрении сигнатура  $(-+++)$ .

Для пояснения смысла входящей в уравнение (1) величины  $\Phi_\alpha$  необходимо ввести систему реперных векторов  $H_{\underline{\nu}}^\alpha$ , определяемых соотношением

$$H_{\underline{\nu}}^\alpha H_{\underline{\mu}}^\beta g_{\alpha\beta} = \eta_{\underline{\mu}\underline{\nu}}, \quad (2)$$

где  $\eta_{\underline{\mu}\underline{\nu}}$  – метрический тензор в касательном плоском пространстве-времени. В последующем полагается, что

$\eta_{\underline{\mu}\underline{\nu}} = \text{diag}(-1, 1, 1, 1)$ . Матрицы  $\gamma_{\underline{\nu}} = H_{\underline{\nu}}^\alpha \gamma_\alpha$  будем называть реперными матрицами Дирака. Они могут быть выбраны постоянными по всему пространству. Например, в стандартном представлении  $\gamma_0 = -i\rho_3$ ;  $\gamma_k = \rho_2\sigma_k$ . Латинские индексы принимают значения 1, 2, 3.

Величину  $\Phi_\alpha$  будем называть биспинорной связностью, она выражается через так называемые коэффициенты вращения Риччи  $\Phi_{\alpha\ \underline{\mu}\underline{\nu}}$

$$\Phi_{\alpha\ \underline{\mu}\underline{\nu}} \equiv H_{\underline{\mu}}^\sigma H_{\underline{\nu}\sigma;\alpha} \quad (3)$$

следующим образом:

$$\Phi_\alpha = \frac{1}{4}\Phi_{\alpha\ \underline{\mu}\underline{\nu}}S^{\underline{\mu}\underline{\nu}}. \quad (4)$$

Здесь

$$H_{\underline{\nu}\sigma;\alpha} = H_{\underline{\nu}\sigma} - \left(\begin{matrix} \varepsilon \\ \alpha\sigma \end{matrix}\right)H_{\underline{\nu}\varepsilon}, \quad S^{\underline{\mu}\underline{\nu}} = \frac{1}{2}(\gamma^{\underline{\mu}}\gamma^{\underline{\nu}} - \gamma^{\underline{\nu}}\gamma^{\underline{\mu}}).$$

Реперы  $H_{\underline{\nu}}^\alpha$  определены с точностью до преобразований Лоренца, зависящих от координат. Ничем другим выбор конкретного вида реперов не ограничен. Каждому набору реперов соответствуют ассоциированные с ними коэффициенты  $\Phi_{\alpha\ \underline{\mu}\underline{\nu}}$ .

Проблема свободы выбора системы  $H_{\underline{\nu}}^\alpha$  различными авторами решается по-разному. Наиболее часто эта система выбирается с учетом свойств используемых мировых координат и метрического тензора. Допустим, гравитационное поле описывается рассмотренной в работе [1] метрикой вида

$$ds^2 = -V^2 c^2 dt^2 + W^2 dx^m dx^n \delta_{mn}. \quad (5)$$

Здесь  $V, W$  – две произвольные функции от пространственных координат. Тогда в качестве системы реперов может быть использована система

$$H_0^\alpha = \frac{1}{V} \delta_0^\alpha, \quad H_k^\alpha = \frac{1}{W} \delta_k^\alpha. \quad (6)$$

В работе [6] приведен перечень многих других систем реперов, используемых различными авторами в различных задачах.

В самодостаточной теории должен содержаться некий принцип, устраняющий произвол в выборе реперов. Пока во всех опубликованных версиях теории движения дираковских частиц в гравитационных полях этот вопрос не нашел приемлемого однозначного решения. Цель данной работы состоит в формулировке такого принципа.

Отправной точкой предлагаемого нами принципа является подход, используемый для описания динамики спина классических спиновых частиц в гравитационном поле. Этот подход известен достаточно давно (см., например, [7–9]) и состоит в использовании так называемой системы сопутствующих реперов. Под сопутствующим репером будем понимать такой репер, в котором спиновый вектор частицы имеет только пространственные компоненты, а временная компонента спина равна нулю. Система сопутствующих реперов – это совокупность реперов, являющихся сопутствующими в каждой точке мировой линии частицы.

В последнее время этот подход был использован для предсказания и объяснения эксперимента Gravity Probe B с гироскопами на борту космического корабля, обращавшегося вокруг Земли (см. [10]). В частности, в эксперименте была зарегистрирована спин-орбитальная прецессия гироскопов, совпадающая с предсказаниями теории с точностью лучше 1 %. Тем самым подтверждена жизнеспособность использованного подхода.

Дираковская частица также обладает спином, и поэтому использование сопутствующих реперов для описания динамики ее спина представляется вполне уместным. Использование сопутствующих реперов и предлагается нами как тот единственный способ описания динамики частицы, который приводит к результатам, регистрируемым в экспериментах со спиновыми частицами.

Использование сопутствующих реперов демонстрируется в данной работе на примере гравитационного поля решения Керра (РК). Насколько мы понимаем, наиболее существенным результатом нашего рассмотрения является построение гамильтониана, представляющего собой эрмитов оператор. Результаты обсуждаются и кратко сравниваются с результатами других работ.

## 2. Уравнение Дирака в реперных обозначениях

При любом выборе системы реперов справедливо соотношение

$$g^{\alpha\beta} = -H_0^\alpha H_0^\beta + H_k^\alpha H_k^\beta. \quad (7)$$

Тензоры

$$-H_0^\alpha H_0^\beta, \quad H_k^\alpha H_k^\beta \quad (8)$$

составляют полную систему проекторов. Запишем уравнение Дирака (1), заменив в уравнении (1) метрический тензор на сумму двух проекторов (8).

$$-H_0^\alpha H_0^\beta \gamma_\alpha \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x^\beta} + \Phi_\beta \Psi \right) + H_k^\alpha H_k^\beta \gamma_\alpha \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x^\beta} + \Phi_\beta \Psi \right) - \frac{mc}{\hbar} \Psi = 0. \quad (9)$$

Поскольку  $H_\mu^\alpha \gamma_\alpha = \gamma_\mu$ , то уравнение (9) эквивалентно следующему:

$$-\gamma_0 \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x^0} + \Phi_0 \Psi \right) + \gamma_k \left( \frac{\partial \Psi}{\partial x^k} + \Phi_k \Psi \right) - \frac{mc}{\hbar} \Psi = 0. \quad (10)$$

Здесь введены обозначения

$$\frac{\partial}{\partial x^0} \equiv H_0^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\alpha}; \quad \frac{\partial}{\partial x^k} \equiv H_k^\alpha \frac{\partial}{\partial x^\alpha}; \quad (11)$$

$$\Phi_0 \equiv H_0^\alpha \Phi_\alpha; \quad \Phi_k \equiv H_k^\alpha \Phi_\alpha.$$

Умножим уравнение (10) слева на  $-i\hbar\gamma_0$  и воспользуемся тождеством  $\gamma_0\gamma_0 = -1$

$$-i\hbar c \frac{\partial \Psi}{\partial x^0} - i\hbar c \Phi_0 \Psi - i\hbar c \gamma_0 \gamma_k \frac{\partial \Psi}{\partial x^k} - i\hbar c \gamma_0 \gamma_k \Phi_k \Psi + imc^2 \gamma_0 \Psi = 0. \quad (12)$$

В другой форме это уравнение записывается как

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial \tilde{t}} = \hat{H} \Psi, \quad (13)$$

где  $\tilde{t} = dx^0/c$ ,  $\hat{H}$  имеет смысл оператора Гамильтона,

$$\hat{H} = imc^2 \gamma_0 + c \gamma_0 \gamma_k \hat{p}_k - i\hbar c \Phi_0 - i\hbar c \gamma_0 \gamma_k \Phi_k, \quad (14)$$

а входящий в  $\hat{H}$  оператор  $\hat{p}_k$  определен соотношением

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k}. \quad (15)$$

Уравнение (13) с оператором  $\hat{H}$  в виде (14) будем называть уравнением Дирака в реперных обозначениях. Как видим, конструкция построенного гамильтониана полностью "привязана" к используемой при рассмотрении системе реперов.

## 3. Реперы, связанные с полем РК

Разложения компонент метрики РК, записанного в гармонических координатах, получены в работе [11]. В первом неисчезающем приближении имеем

$$g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + h_{\alpha\beta}; \quad g^{\alpha\beta} = \eta^{\alpha\beta} - h^{\alpha\beta}; \quad (16)$$

$$h_{00} = 2 \frac{M}{R}; \quad h_{0k} = 2 \frac{M (J_{kl} R_l)}{R^3}; \quad h_{mn} = 2 \frac{M}{R} \delta_{mn}. \quad (17)$$

$$\left. \begin{aligned} g_{00} &= -1 + 2\frac{M}{R}; & g_{0k} &= 2\frac{M(J_{kl}R_l)}{R^3}; & g_{mn} &= \delta_{mn} + 2\frac{M}{R}\delta_{mn}; \\ g^{00} &= -1 - 2\frac{M}{R}; & g^{0k} &= 2\frac{M(J_{kl}R_l)}{R^3}; & g^{mn} &= \delta_{mn} - 2\frac{M}{R}\delta_{mn}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Соответствующие символы Кристоффеля имеют следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \left( \begin{matrix} 0 \\ 00 \end{matrix} \right) &= 0; & \left( \begin{matrix} 0 \\ 0k \end{matrix} \right) &= \frac{MR_k}{R^3}; & \left( \begin{matrix} 0 \\ mn \end{matrix} \right) &= 3\frac{M[(J_{ml}R_l)R_n + (J_{nl}R_l)R_m]}{R^5}; \\ \left( \begin{matrix} k \\ 00 \end{matrix} \right) &= \frac{MR_k}{R^3}; & \left( \begin{matrix} m \\ 0n \end{matrix} \right) &= 2\frac{MJ_{mn}}{R^3} - 3\frac{M[(J_{ml}R_l)R_n - (J_{nl}R_l)R_m]}{R^5}; \\ \left( \begin{matrix} k \\ mn \end{matrix} \right) &= -\frac{M}{R^3}[\delta_{km}R_n + \delta_{kn}R_m - \delta_{mn}R_k]. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Уравнениями на нахождение реперных векторов являются соотношения (2). В данной работе мы будем пользоваться решением этих уравнений в так называемой симметричной калибровке. Это решение имеет вид

$$H_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2}h_{\alpha\beta}. \quad (20)$$

При  $h_{\alpha\beta} = 0$  так введенные реперы совпадают с реперами фонового пространства; а при  $h_{\alpha\beta} \neq 0$  представляют собой симметричное решение уравнения

$$g_{\alpha\beta} = \eta_{\alpha\beta} + h_{\alpha\beta} = H_{\alpha}^{\mu}\eta_{\mu\nu}H_{\beta}^{\nu}.$$

В первом приближении по компонентам  $h_{\alpha\beta}$  исчезает различие между мировыми и реперными индексами, поэтому подчеркивание индексов будем опускать, если это не ведет к недоразумениям. Пользуясь этими правилами, находим компоненты реперов с нижними индексами

$$\left. \begin{aligned} H_{\underline{0}0} &= -\left[1 - \frac{M}{R}\right]; & H_{\underline{0}k} &= \frac{M(J_{kl}R_l)}{R^3}; \\ H_{\underline{k}0} &= \frac{M(J_{kl}R_l)}{R^3}; & H_{\underline{p}k} &= \delta_{pk}\left[1 + \frac{M}{R}\right]. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

Реперы с индексами иного типа получаются из системы (21) путем поднятия соответствующих индексов. Напомним, что индексы с крышкой опускаются и поднимаются с помощью тензоров  $\eta_{\alpha\beta}$ ,  $\eta^{\alpha\beta}$ , а мировые индексы – с помощью тензоров  $g_{\alpha\beta}$ ,  $g^{\alpha\beta}$ .

#### 4. Сопутствующие реперы в поле РК

Мы исходим из предположения, что для дираковской частицы в гравитационном поле может быть вве-

дено понятие траектории движения и что эта траектория описывается уравнением Матиссона – Папапетру [12, 13], т. е. уравнением:

$$\frac{Du^{\alpha}}{D\tau} = -\frac{1}{2}R^{\alpha}_{\beta\mu\nu}u^{\beta}u^{\mu}s^{\nu}, \quad (22)$$

где  $R^{\alpha}_{\beta\mu\nu}$  – тензор кривизны, дуальный к тензору Римана,  $R^{\alpha}_{\beta\mu\nu} \equiv E^{\alpha}_{\beta\tau\rho}R^{\tau\rho}_{\mu\nu}$ . Такое предположение заведомо выполняется, если длина волны де Бройля для дираковской частицы много меньше характерной длины, на которой изменяется гравитационное поле.

В поле РК правая часть в соотношении (22) имеет тот же порядок малости, что и левая, следовательно движение частицы не сводится к движению по геодезической. Требование совпадения

$$\tilde{H}_{\underline{\alpha}}^{\alpha} \equiv u^{\alpha} \quad (23)$$

(сопутствующий репер здесь и далее помечаем тильдой сверху) означает, что сопутствующая система реперов является неинерциальной.

Неинерциальность системы  $\tilde{H}_{\underline{\alpha}}^{\mu}$  приводит к тому, что в каждой точке мировой линии система векторов  $\tilde{H}_{\underline{\alpha}}^{\mu}$  отличается от стационарной системы векторов  $H_{\underline{\alpha}}^{\mu}$  малым преобразованием Лоренца типа буста (см. [8, 9]).

Приводим заимствованную из работы [9] (задача 11.11) совокупность величин  $\tilde{H}_{\underline{\alpha}\beta}$

$$\left. \begin{aligned} \tilde{H}_{\underline{0}0} &= \left[-1 + \frac{M}{R} - \frac{1}{2}(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)\right]; & \tilde{H}_{\underline{0}k} &= \dot{\eta}_k \left[1 + 3\frac{M}{R} + \frac{1}{2}(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)\right] + 2\frac{M(J_{kl}R_l)}{R^3}; \\ \tilde{H}_{\underline{m}0} &= -\dot{\eta}_k \left[1 + \frac{M}{R} + \frac{1}{2}(\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l)\right]; & \tilde{H}_{\underline{m}k} &= \delta_{kp} \left[1 + \frac{M}{R}\right] + \frac{1}{2}\dot{\eta}_k \dot{\eta}_p. \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

По формуле (3) находим

$$\tilde{\Phi}_{0\ 0\underline{k}} = \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \dot{\eta}_k - 2 \frac{M(J_{kp} \dot{\eta}_p)}{R^3} + 3 \frac{M[(J_{kl} R_l)(R_l \dot{\eta}_l) - (\dot{\eta}_a J_{ab} R_b) R_k]}{R^5}, \quad (25)$$

$$\tilde{\Phi}_{0\ \underline{mn}} = + \frac{1}{2} \frac{M[R_m \dot{\eta}_n - R_n \dot{\eta}_m]}{R^3} + 2 \frac{MJ_{mn}}{R^3} - 3 \frac{M[(J_{ml} R_l) R_n - (J_{nl} R_l) R_m]}{R^5}, \quad (26)$$

$$\tilde{\Phi}_{m\ 0\underline{k}} = \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \delta_{km} + 2 \frac{M}{R^3} \dot{\eta}_k R_m - \frac{M}{R^3} \dot{\eta}_m R_k - 2 \frac{MJ_{km}}{R^3} + 3 \frac{M[(J_{kl} R_l) R_m - (J_{ml} R_l) R_k]}{R^5}, \quad (27)$$

$$\tilde{\Phi}_{p\ \underline{mn}} = \frac{M[R_m \delta_{pn} - R_n \delta_{mp}]}{R^3}. \quad (28)$$

Биспинорные связности  $\tilde{\Phi}_{\underline{0}}$ ,  $\tilde{\Phi}_{\underline{k}}$  находятся с использованием соотношений (4), (11)

$$\tilde{\Phi}_{\underline{0}} = \frac{1}{4} \tilde{H}_{\underline{0}}^0 [2\tilde{\Phi}_{0\ 0\underline{k}} S^{0\underline{k}} + \tilde{\Phi}_{0\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}}] + \frac{1}{4} \tilde{H}_{\underline{0}}^p [2\tilde{\Phi}_{p\ 0\underline{k}} S^{0\underline{k}} + \tilde{\Phi}_{p\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}}]; \quad (29)$$

$$\tilde{\Phi}_{\underline{m}} = \frac{1}{4} \tilde{H}_{\underline{m}}^0 [2\tilde{\Phi}_{0\ 0\underline{k}} S^{0\underline{k}} + \tilde{\Phi}_{0\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}}] + \frac{1}{4} \tilde{H}_{\underline{m}}^p [2\tilde{\Phi}_{p\ 0\underline{k}} S^{0\underline{k}} + \tilde{\Phi}_{p\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}}]. \quad (30)$$

Подставим в формулы для  $\tilde{\Phi}_{\underline{0}}$ ,  $\tilde{\Phi}_{\underline{k}}$  выражения для реперов и коэффициентов вращения Риччи. Оставляя в соотношениях (29), (30) главные члены разложения, получаем

$$\tilde{\Phi}_{\underline{0}} = \frac{1}{4} (\tilde{H}_{\underline{0}}^0 \tilde{\Phi}_{0\ \underline{ab}} + \tilde{H}_{\underline{0}}^p \tilde{\Phi}_{p\ \underline{ab}}) S^{\underline{ab}}; \quad (31)$$

$$\tilde{\Phi}_{\underline{m}} = \frac{1}{4} \tilde{H}_{\underline{m}}^p \tilde{\Phi}_{p\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}} + \frac{1}{2} \tilde{H}_{\underline{m}}^p \tilde{\Phi}_{p\ 0\underline{k}} S^{0\underline{k}}. \quad (32)$$

В поле РК соотношения (31), (32) принимают следующий вид:

$$\tilde{\Phi}_{\underline{0}} = \frac{1}{4} \tilde{\Phi}_{0\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}} + \frac{1}{4} \dot{\eta}_p \tilde{\Phi}_{p\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}} = \frac{3}{8} \frac{M[R_a \dot{\eta}_b - R_b \dot{\eta}_a]}{R^3} S^{\underline{ab}} + \frac{1}{2} \frac{MJ_{\underline{ab}}}{R^3} S^{\underline{ab}} - \frac{3}{4} \frac{M[(J_{al} R_l) R_b - (J_{bl} R_l) R_a]}{R^5} S^{\underline{ab}}; \quad (33)$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{\underline{m}} = \frac{1}{4} \tilde{\Phi}_{m\ \underline{ab}} S^{\underline{ab}} + \frac{1}{2} \tilde{\Phi}_{m\ 0\underline{k}} S^{0\underline{k}} = \frac{1}{4} \frac{M[R_a \delta_{mb} - R_b \delta_{ma}]}{R^3} S^{\underline{ab}} + \frac{1}{2} \left( \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \delta_{km} + 2 \frac{M}{R^3} \dot{\eta}_k R_m - \frac{M}{R^3} \dot{\eta}_m R_k \right) S^{0\underline{k}} + \\ + \frac{1}{2} \left( -2 \frac{MJ_{km}}{R^3} + 3 \frac{M[(J_{kl} R_l) R_m - (J_{ml} R_l) R_k]}{R^5} \right) S^{0\underline{k}}. \end{aligned} \quad (34)$$

## 5. Гамильтониан

Подставляя матричные связности (33), (34) в гамильтониан (14), получаем

$$\begin{aligned} \hat{H} = imc^2 \gamma_{\underline{0}} + c \gamma_{\underline{0}} \gamma_{\underline{k}} \hat{p}_{\underline{k}} + i\hbar c \frac{MR_{\underline{k}}}{R^3} \gamma_{\underline{0}} \gamma_{\underline{k}} + 2i\hbar c \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} + \frac{3}{8} i\hbar c \frac{M[R_a \dot{\eta}_b - R_b \dot{\eta}_a]}{R^3} S^{\underline{ab}} + \\ + \frac{1}{2} i\hbar c \left\{ \frac{MJ_{\underline{ab}}}{R^3} - \frac{3}{2} \frac{M[(J_{al} R_l) R_b - (J_{bl} R_l) R_a]}{R^5} \right\} S^{\underline{ab}}. \end{aligned} \quad (35)$$

Уравнение Дирака (13) с гамильтонианом (35) запишем в иной форме

$$i\hbar c \left( \frac{\partial}{\partial x^{\hat{0}}} - 2 \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \right) \psi = \hat{H} \psi, \quad (36)$$

где под оператором  $\hat{H}$  понимается оператор

$$\hat{H} = imc^2 \gamma_0 - i\hbar c \gamma_0 \gamma_k \left( \frac{\partial}{\partial x^k} - \frac{MR_k}{R^3} \right) + \frac{3}{8} i\hbar c \frac{M [R_a \dot{\eta}_b - R_b \dot{\eta}_a]}{R^3} S^{ab} + \frac{1}{2} i\hbar c \left\{ \frac{MJ_{ab}}{R^3} - \frac{3}{2} \frac{M [(J_{al} R_l) R_b - (J_{bl} R_l) R_a]}{R^5} \right\} S^{ab}. \quad (37)$$

## 6. Скалярное произведение в гильбертовом пространстве

В сопутствующей системе отсчета введем гильбертово пространство состояний дираковской частицы. Если  $\varphi$  и  $\psi$  – два произвольных вектора состояний в гильбертовом пространстве, то их скалярное произведение  $\langle \varphi, \psi \rangle$  запишем в том виде, как это обычно делается в квантовой механике, т. е. в виде интеграла по 3-мерному пространству

$$\langle \varphi, \psi \rangle = \int_{\tilde{V}} \bar{\varphi} \psi \cdot \rho d\tilde{V}. \quad (38)$$

Величина  $\bar{\varphi} \psi$  представляет собой произведение биспинорной строчки на биспинорный столбец и по своим трансформационным свойствам является обычной скалярной комплексной функцией. Черта над биспинором означает дираковское сопряжение. Величина  $\rho$  представляет собой так называемую "весовую" функцию, вид которой сейчас будет установлен.

Примем, что ковариантное выражение для элемента 4-объема  $\sqrt{-g} d\Omega$ , построенного на четырех малых векторах  $dx_0^\alpha, dx_1^\beta, dx_2^\mu, dx_3^\nu$ , имеет следующий вид:

$$\sqrt{-g} d\Omega = \tilde{H}_\alpha^0 \tilde{H}_\beta^1 \tilde{H}_\mu^2 \tilde{H}_\nu^3 dx_0^\alpha dx_1^\beta dx_2^\mu dx_3^\nu. \quad (39)$$

По символам, содержащимся между левой и правой квадратными скобками, здесь производится антисимметризация. Элемент 3-объема, по которому необходимо интегрировать в (38), должен быть ортогональным к векторам  $\tilde{H}_\alpha^k$ , поэтому он должен быть величиной следующего вида:

$$\sqrt{-g} d\Omega_\alpha^0 = \tilde{H}_\alpha^0 \tilde{H}_\beta^1 \tilde{H}_\mu^2 \tilde{H}_\nu^3 dx_1^\beta dx_2^\mu dx_3^\nu. \quad (40)$$

Используем явные выражения для векторов сопутствующего репера. Оказывается, что в главных порядках приближения выражение (40) может быть записано как

$$\rho d\tilde{V} = \sqrt{-g} d\Omega_\alpha^0 = \tilde{H}_0^0 \det(\tilde{H}_m^k) d\tilde{V} = \left[ 1 - \frac{M}{R} + \frac{1}{2} (\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) \right] \left[ 1 + 3 \frac{M}{R} + \frac{1}{2} (\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) \right] d\tilde{V} = \left[ 1 + 2 \frac{M}{R} + (\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) \right] d\tilde{V}. \quad (41)$$

Отсюда получаем выражение для "весовой" функции

$$\rho = \left[ 1 + 2 \frac{M}{R} + (\dot{\eta}_l \dot{\eta}_l) \right]. \quad (42)$$

## 7. Эрмитовость гамильтониана

Предположим, в пространстве состояний задан некий оператор  $\hat{A}$ . Если для любых двух векторов состояния  $\varphi$  и  $\psi$  выполняется соотношение

$$\langle \varphi, \hat{A} \psi \rangle = \langle \hat{A} \varphi, \psi \rangle, \quad (43)$$

то оператор  $\hat{A}$  называется эрмитовым. Свойство эрмитовости будем обозначать как  $\hat{A}^+ = \hat{A}$ .



Наличие "весаого" множителя  $\rho$  в выражении (38) не сказывается на свойствах эрмитовости тех частей операторов, которые не содержат операции дифференцирования. В случае, если оператор содержит операцию дифференцирования, выяснение свойств эрмитовости требует специального рассмотрения. Так, в гамильтониан оператор импульса входит в комбинации

$$\left\{ c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right\}. \quad (44)$$

Для такой комбинации имеем

$$\left\langle \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right) \varphi, \psi \right\rangle = \left\langle \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k \right) \varphi, \psi \right\rangle + \left\langle \left( i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right) \varphi, \psi \right\rangle.$$

После подстановки явного выражения (15) для оператора  $\underline{p}_k$  и интегрирования по частям получаем

$$\begin{aligned} \left\langle \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right) \varphi, \psi \right\rangle &= i\hbar c \int_V \frac{\partial \varphi^+}{\partial x^k} \gamma_0\gamma_k \psi \rho d\tilde{V} - i\hbar c \int_V \varphi^+ \gamma_0\gamma_k \psi \rho dV = \\ &= -i\hbar c \int_V \varphi^+ \gamma_0\gamma_k \frac{\partial \psi}{\partial x^k} \rho d\tilde{V} - i\hbar c \int_V \varphi^+ \gamma_0\gamma_k \psi \frac{\partial \rho}{\partial x^k} d\tilde{V} - i\hbar c \int_V \varphi^+ \gamma_0\gamma_k \psi \rho dV. \end{aligned}$$

Подставляем сюда выражение (42) для "весаогой" функции  $\rho$

$$\begin{aligned} \left\langle \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right) \varphi, \psi \right\rangle &= \left\langle \varphi, \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k \right) \psi \right\rangle + 2i\hbar c \int_V \varphi^+ \gamma_0\gamma_k \psi \left( \frac{MR_k}{R^3} \right) dV - i\hbar c \int_V \varphi^+ \gamma_0\gamma_k \psi \left( \frac{MR_k}{R^3} \right) dV = \\ &= \left\langle \varphi, \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right) \psi \right\rangle. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что

$$\left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right)^+ = \left( c\gamma_0\gamma_k \underline{p}_k + i\hbar c \frac{MR_k}{R^3} \gamma_0\gamma_k \right). \quad (45)$$

С учетом этого соотношения приходим к выводу, что гамильтониан (37) является эрмитовым оператором.

Аналогичным образом доказывается, что эрмитовым оператором является и оператор в левой части уравнения (36). То есть доказывается, что

$$\left[ i\hbar c \left( \frac{\partial}{\partial x^0} - 2 \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \right) \right]^+ = i\hbar c \left( \frac{\partial}{\partial x^0} - 2 \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \right). \quad (46)$$

Таким образом, в обеих частях уравнения (36) стоят эрмитовы операторы.

## 8. Обсуждение результатов

В работе в рамках концепции "пробных частиц" рассмотрена динамика дираковских частиц в гравитационном поле, создаваемом массивным вращающимся телом. Степени свободы, описывающие движение, разделены в проведенном рассмотрении на две группы. Те из них, которые определяют траекторию движения частиц, находятся квазиклассическим образом – с помощью уравнения Матиссона – Папапетру (22). Степени свободы, связанные с волновой функцией, находятся как решения уравнения Дирака в сопутствующей системе реперов (24), определяемых по мировой линии частицы и параметрам гравитационного поля.

Все члены, входящие в возникший в нашем рассмотрении гамильтониан (37), имеют непосредственный физический смысл. При этом претерпевают изменение операторы импульса  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x^k}$  и энергии  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ . В гравитационном поле аналогами этих операторов становятся операторы

$$-i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x^k} - \frac{MR_k}{R^3} \right), \quad i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x^0} - 2 \frac{M(R_l \dot{\eta}_l)}{R^3} \right).$$

С учетом определения скалярного произведения в гильбертовом пространстве и возникшей в нашем рассмотрении "весаогой" функции (42) эти операторы об-

ладают свойством эрмитовости. Нам представляется, что появление в нашем рассмотрении "весовой" функции  $\rho$  вида (42) является нетривиальным обстоятельством. Например, использование стационарной системы реперов  $H_{\alpha}^{\mu}$ , связанной с полем РК, не приводит, как показали наши вычисления, к появлению нужной "весовой" функции.

В работе доказано, что использование сопутствующей системы реперов  $\tilde{H}_{\alpha}^{\mu}$  в гравитационном поле РК позволяет записать уравнение Дирака в форме уравнения (36), в котором операторы в левой и правой частях являются эрмитовыми.

При нахождении эволюции спина дираковской частицы с гамильтонианом  $\tilde{H}$  (37) войдут зависящие от спина члены двух типов. Один тип будет зависеть от скорости частицы, он описывает геодезическую прецессию спина. Второй тип имеет структуру спин-спиновую, он описывает прецессию Лензе – Тирринга. В результате мы приходим к выводу, что в рассматриваемом приближении поведение спина дираковской частицы аналогично поведению спина классических спиновых частиц.

Из сказанного следует, что для дираковских частиц остаются в силе соображения о характере выполнения принципа эквивалентности в части, касающейся движения спина. Проявляется этот принцип через независимость частот прецессий от величины спина: дираковская частица со спином  $\hbar/2$  прецессирует таким же образом, как и классические спиновые частицы. В то же время мировые линии спиновых частиц в поле РК не совпадают ни между собой, ни с геодезическими, и в этом смысле принцип эквивалентности не выполняется.

Легко убедиться в том, что все полученные выше результаты переходят естественным образом в результаты, соответствующие решению Шварцшильда, если положить  $J_{mn} = 0$ , т. е. положить равным нулю спиновый тензор "большого" тела, порождающего поле гравитации.

Обратим внимание еще на один аспект системы сопутствующих реперов. Имеется в виду нахождение собственного времени частицы  $d\tau = -\frac{1}{c}(u_{\nu}dx^{\nu})$  при движении ее по своей мировой линии. Если выбрать конгруэнцию координатных кривых, одна из которых совпадает с мировой линией частицы, то при смещении частицы на  $dx^{\alpha}$  вдоль траектории движения величина  $d\tau$  может быть найдена, исходя из соотношения  $d\tau = \sqrt{-g_{00}} dt$ . Интегрируя  $d\tau$  вдоль мировой линии, получаем "истинное" время частицы, т. е. то время, которое показывали бы атомные часы, покоящиеся относительно частицы. Такой способ нахождения времени совпадает со способом, применяемым в ОТО при подсчете собственного времени наблюдателя, движущегося произвольным образом (см., например, [14], § 84).

Из сказанного следует, что использование сопутствующей системы реперов означает по существу использование той системы отсчета, в которой справедливы законы квантовой механики, определяющие, в частности, ход атомных часов. Не случайно, что именно в этой системе оказывается возможным записать уравнение Дирака в форме уравнения Шредингера с эрмитовым гамильтонианом.

По нашему мнению, в тех работах, в которых не используется система  $\tilde{H}_{\alpha}^{\mu}$ , но достигается эрмитовость гамильтониана, в каком-то месте применяется "незаконная" операция. Так, в случае работы [1] такой операцией является преобразование

$$\psi \rightarrow \psi' = W^{3/2}\psi, \quad \tilde{H} \rightarrow \tilde{H}' = W^{3/2}\tilde{H}W^{-3/2},$$

которое не унитарно.

В работе мы не касались вопроса об интерпретации полученных результатов в представлении Фолди – Ваутхайзена. Техника этого представления в настоящее время достаточно развита (см., например, [2, 15]). По-видимому, изложенная здесь динамика дираковской частицы в гравитационном поле РК может быть естественным образом рассмотрена в указанном представлении.

## Благодарности

Один из авторов (МГ) выражает глубокую признательность В. П. Незнамову за ряд полезных обсуждений вопросов, рассмотренных в данной работе.

## Список литературы

1. Obukhov Yu. N. Spin, gravity, and inertia. ArXiv: gr-qc/0012102.
2. Silenko A. J., Teryaev O. V. Semiclassical limit for Dirac particles interacting with a gravitational field // Phys. Rev. 2005. D71. 064016.
3. Arminjon Mayeul. Post-Newtonian equation for the energy levels of a Dirac particle in a static metric // Phys. Rev. 2006. D74. 065017.
4. Померанский А. А., Сеньков Р. А., Хриплович И. Б. Релятивистские частицы с внутренним моментом во внешних полях // УФН. 2000. Vol. 170, № 10. С. 1129.
5. Khriplovich I. B. Spinning Relativistic Particles in External Fields. E-print. arXiv: 0801.1881v1 [gr-qc].
6. Silenko A. J. Classical and quantum spins in curved spacetimes. E-print. arXiv: 0802.4443v1 [gr-qc].
7. Weinberg S. Gravitation and Cosmology. John Wiley & Sons. Hoboken, 1972. [Вейнберг С. Гравитация и космология. Изд. Платон, 2000].
8. Misner C. W., Thorne K. S., Wheeler J. A. Gravitation. W. H. Freeman, San Francisco, 1973. [Мизнер Ч., Торн К., Уилер Дж. Гравитация. М.: Мир, 1977].

9. Lightman A. P., Press W. H., Price R. H., Teukolsky S. A. Problem book in relativity and gravitation. Princeton Univ. Press, 1975. [Лайтман А., Пресс В., Прайс Р., Тюкольски С. Сборник задач по теории относительности и гравитации. М.: Мир, 1979].
10. Final Report on the experiment Gravity Probe B. // [www.einstein.stanford.edu](http://www.einstein.stanford.edu).
11. Горбатенко М. В., Горбатенко Т. М. Можно ли решение Керра найти методом Эйнштейна – Инфельда-Гоффмана? // ТМФ. 2004. Том 140, №1. С. 160. [Theor. and Math. Phys. July 2004. Vol. 140, Issue 1. P. 1028].
12. Mathisson M. // Acta Phys. Pol. 1937. Vol. 6. P. 163.
13. Papapetrou A. // Proc. Roy. Soc. Lond. 1951. Vol. A209. P. 248.
14. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1988.
15. Незнамов В. П. К теории взаимодействующих полей в представлении Фолди – Ваутхайзена // Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2006. Т. 37. Вып. 1. С. 152.

Статья поступила в редакцию 03.09.2008.

## РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЛАЗМЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ САМОСОГЛАСОВАННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ХАРТРИ – ФОКА – СЛЭТЕРА ПРОГРАММЫ THERMOS

М. А. Вронский, Е. А. Карповцев, Е. Ю. Попов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Приводятся формулы для вычисления методом Чепмена – Энскога коэффициентов электропроводности и теплопроводности в неидеальной плазме с использованием самосогласованного потенциала Хартри – Фока – Слэтера, вычисляемого программой THERMOS. Находится приближенное решение уравнения Больцмана для плотности электронной компоненты плазмы, в котором для части, соответствующей электрон-ионным столкновениям берется транспортное сечение, определяемое самосогласованным потенциалом Хартри – Фока – Слэтера. Приводятся результаты расчетов коэффициентов и их сравнение с результатами расчетов, полученных другими методами.

### Введение

В настоящей работе рассчитываются транспортные коэффициенты плазмы, которые определяются процессами рассеяния свободных электронов на частично ионизованных атомах и других свободных электронах. Знание кинетических коэффициентов необходимо для проведения газодинамических расчетов по программам неравновесной радиационной газовой динамики при схлопывании лайнера Z-пинча электрофизической установки ЭМИР, а также для расчета генерации и переноса рентгеновского излучения в отсек термоядерной мишени.

В работе в качестве примеров расчетов приводятся коэффициенты электронной теплопроводности и проводимости для W (задачи по схлопыванию лайнера Z-пинча) и Ве (задачи по сжатию, термоядерному воспламенению и горению термоядерной мишени).

Общая методика вычисления кинетических коэффициентов с помощью приближения Чепмена – Энскога описана в работе [3, 5]. В данной работе мы сосредоточиваемся на вычислении коэффициентов электро- и теплопроводности. Задача состоит в нахождении решения линейного неоднородного интегрального уравнения с последующим усреднением этого решения с некоторым весом. Мы рассматриваем рассеяние электрона на атомной ячейке с самосогласованным потенциалом Хартри – Фока – Слэтера, рассчитываемым программой THERMOS. Таким образом, мы учитываем неидеальность плазмы и получаем сходящееся выражение для транспортного сечения (в отсутствие экрани-

ровки для кулоновского поля приходится прибегать к расчетам "с логарифмической точностью").

### Вычисление поправки для двухкомпонентной плазмы

Рассмотрим систему, состоящую из электронов и одинаковых ионов. Будем считать плазму не слишком сильно сжатой, т. е. будем учитывать только бинарные столкновения и пренебрегать столкновениями большей кратности. Нашей задачей является нахождение коэффициентов теплопроводности и электропроводности, исходя из системы кинетических уравнений Больцмана.

Выпишем уравнения Больцмана для электронной и ионной компонент:

$$\frac{\partial f_e}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f_e}{\partial x_\alpha} + \frac{F_{e\alpha}}{m_e} \frac{\partial f_e}{\partial v_\alpha} = C_{ee}(f_e, f_e) + C_{ei}(f_e, f_i);$$

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f_i}{\partial x_\alpha} + \frac{F_{i\alpha}}{m_i} \frac{\partial f_i}{\partial v_\alpha} = C_{ie}(f_i, f_e) + C_{ii}(f_i, f_i),$$

где  $f_e$  и  $f_i$  – функции распределения электронов и ионов;  $m_e$  и  $m_i$  – массы электронов и ионов;  $F_e$  и  $F_i$  – действующие на них силы;  $C_{\alpha\beta}(f_\alpha, f_\beta) = \iint (f_\alpha(\vec{v}'_\alpha) f_\beta(\vec{v}'_\beta) - f_\alpha(\vec{v}_\alpha) f_\beta(\vec{v}_\beta)) |\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta| \times \times \sigma(\vec{n}, |\vec{v}_\alpha - \vec{v}_\beta|) d\vec{n} d\vec{v}_\beta$  – интегралы столкновений.

Как показывают оценки, перекрестный член в уравнении для ионной компоненты мал, поэтому им можно пренебречь.

Задача о нахождении ионной теплопроводности решается аналогично изложенному в предыдущем параграфе. Функцию распределения электронов запишем в виде  $f_e = f_{e0}(1 + \Phi)$ , где  $\Phi$  – малая поправка к функции распределения электронов, а функцию распределения ионов полагаем максвелловской. Уравнение Больцмана для электронной компоненты примет вид

$$Df_e \equiv \frac{\partial f_e}{\partial t} + v_\alpha \frac{\partial f_e}{\partial x_\alpha} + \frac{F_{e\alpha}}{m_e} \frac{\partial f_e}{\partial v_\alpha} = C_{ee}(f_{e0}, f_{e0}\Phi) + C_{ee}(f_{e0}\Phi, f_{e0}) + C_{ei}(f_{e0}\Phi, f_i).$$

Перепишем это уравнение в виде

$$Df_{e0}(\vec{v}) = f_0(\vec{v}) \int \left( \Phi(\vec{v}') + \Phi(\vec{v}_1') - \Phi(\vec{v}) - \Phi(\vec{v}_1) \right) \times \\ \times f_0(\vec{v}_1) |\vec{v} - \vec{v}_1| \sigma_{ee} d\vec{n} d\vec{v}_1 + \\ + f_0(\vec{v}) \int \left( \Phi(\vec{v}') - \Phi(\vec{v}) \right) f_i(\vec{v}_i) |\vec{v} - \vec{v}_i| \sigma_{ei} d\vec{n} d\vec{v}_i.$$

Электрон-ионный интеграл столкновений значительно упрощается, если считать скорость ионной компоненты постоянной и функцию распределения равной  $f_i(\vec{v}_i) = n_i \delta(\vec{v}_i)$ , где  $n_i$  – пространственная концентрация ионов. Мы принимаем такое приближение, исходя из того, что средние скорости ионов значительно меньше скоростей электронов. В этом случае электрон-ионный интеграл столкновений становится равным

$$\int (\Phi(v\vec{n}) - \Phi(\vec{v})) v \sigma(\vec{n}, v) d\vec{n}.$$

Если нарушающий равновесие фактор – малая векторная величина, то левая часть уравнения Больцмана будет линейным функционалом от этой возмущающей величины. Поэтому решение будем искать в виде

$$\Phi(\vec{v}) = (\vec{x}, \vec{v}) g(v),$$

где  $\vec{x}$  – возмущающий фактор.

После подстановки этой функции в интеграл электрон-ионных столкновений он примет вид

$$(\vec{x}, \vec{v}) v g(v) \int_0^\pi 2\pi (\cos \theta - 1) \sin \theta \sigma(\theta, v) d\theta = \\ = -2\pi (\vec{x}, \vec{v}) v g(v) \sigma_{tr}(v),$$

где  $\sigma_{tr}(v) = \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sin \theta \sigma(\theta, v) d\theta$  – транспортное сечение.

Для вычисления коэффициента электропроводности необходимо решить уравнение Больцмана

$$\frac{(\vec{E}, \vec{v})}{T} = K(\Phi_1) - 2\pi (\vec{E}, \vec{v}) \sigma_{tr} n_i g_1(v),$$

где  $K(\Phi)$  – интеграл  $ee$ -столкновений;  $\Phi_1 = (\vec{E}, \vec{v}) g_1(v)$ .

Учитывая линейность уравнения и произвольность  $\vec{E}$ , получим

$$\frac{\vec{v}}{T} = K(\vec{v} g_1(v)) - 2\pi \vec{v} \sigma_{tr} n_i g_1(v) v. \quad (1)$$

Решив это уравнение относительно  $g_1$ , подставим решение в интеграл

$$\vec{j} = -\int \vec{v} (\vec{E}, \vec{v}) g_1(v) f_0(v) d\vec{v} = -4\pi \vec{E} \int_0^\infty \frac{v^2}{3} g_1(v) f_0(v) v^2 dv.$$

Таким образом, проводимость выразится в виде

$$\Sigma = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 g_1(v) f_0(v) dv.$$

## Вычисление коэффициента теплопроводности

При наличии градиента температуры в плазме создается ненулевое электрическое поле, поэтому при вычислении коэффициента электронной теплопроводности приходится учитывать два возмущающих фактора. Уравнение Больцмана в этом случае записывается в виде

$$\frac{f_0}{T} (e\vec{E} + \nabla\mu, \vec{v}) + \frac{f_0 (mv^2/2 - \mu)}{T^2} (\nabla T, \vec{v}) = St(\delta f).$$

Здесь  $\mu$  – химический потенциал. Вычисление коэффициента теплопроводности нужно проводить в два этапа. Сначала вычислим термоэлектрический коэффициент. Для этого положим  $e\vec{E} = \nabla\mu$ .

Решая уравнение Больцмана

$$\frac{mv^2/2 - \mu}{T^2} (\nabla T, \vec{v}) K(\Phi_2) - 2\pi (\nabla T, \vec{v}) \sigma_{tr}(v) n_i g_2(v) v$$

или учитывая произвольность градиента температуры

$$\frac{mv^2/2 - \mu}{T^2} \vec{v} = K(\vec{v} g_2(v)) - 2\pi \vec{v} \sigma_{tr}(v) n_i g_2(v) v, \quad (2)$$

находим термоэлектрический коэффициент  $\alpha$  из уравнения

$$\vec{j} = -\int \vec{v} (\nabla T, \vec{v}) g_2(v) f_0(v) d\vec{v} = -\alpha \Sigma \nabla T,$$

или

$$\alpha \Sigma = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 g_2(v) f_0(v) dv.$$

Далее, включая разность температур и электрическое поле так, чтобы  $\vec{E} + \nabla\mu/e = \alpha \nabla T$ , и решая уравнение Больцмана

$$\left( \alpha + \frac{mv^2/2 - \mu}{T} \right) \frac{(\nabla T, \vec{v})}{T} = K(\Phi_3) - 2\pi (\nabla T, \vec{v}) \sigma_{tr} n_i g_3(v) v,$$

или

$$\left( \alpha + \frac{mv^2/2 - \mu}{T} \right) \frac{\vec{v}}{T} = K(\vec{v} g_3(v)) - 2\pi \vec{v} \sigma_{tr} n_i g_3(v) v, \quad (3)$$

вычислим коэффициент теплопроводности из соотношения

$$\bar{q} = -\chi \nabla T = \int \bar{v} \frac{v^2}{2} (\nabla T, \bar{v}) g_3(v) f_0(v) d\bar{v},$$

откуда следует, что

$$\chi = -\frac{2\pi}{3} \int v^6 g_3(v) f_0(v) dv.$$

Из сравнения уравнений (1), (2) и (3) видно, что  $g_3 = \alpha g_1 + g_2$ . Для упрощения вычислений вместо уравнения (2) будем решать уравнение

$$\frac{mv^2}{2T^2} \bar{v} = K(vh_2) - 2\pi \bar{v} \sigma_{tr}(v) n_i h_2(v)v, \quad (4)$$

а затем выразим  $g_2 = h_2 - \frac{\mu}{T} g_1$ .

Таким образом, нужно решить два уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\bar{v}}{T} &= K(\bar{v}g(v)) - 2\pi \bar{v} \sigma_{tr}(v) n_i g(v)v; \\ \frac{v^2 \bar{v}}{2T^2} &= K(\bar{v}h(v)) - 2\pi \bar{v} \sigma_{tr}(v) n_i h(v)v \end{aligned} \quad (5)$$

и вычислить интегралы

$$S_1 = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 g(v) f_0(v) dv;$$

$$S_2 = -\frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 g(v) f_0(v) dv;$$

$$S_3 = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 h(v) f_0(v) dv;$$

$$\frac{4\pi}{T} \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+4} dv = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}g(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} g(v) \sigma_{tr}(v) dv;$$

$$\frac{2\pi}{T^2} \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+6} dv = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}h(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} h(v) \sigma_{tr}(v) dv.$$

Воспользуемся формулой

$$\int_0^\infty v^a f_0(v) dv = \frac{n_e 2^{a/2} T^{a/2-1} \Gamma((a+1)/2)}{\pi^{3/2}}.$$

Левые части уравнений перепишутся в виде

$$\frac{n_e 2^{m+2} T^m}{\pi^{1/2}} \Gamma(m+5/2) = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}g(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} g(v) \sigma_{tr}(v) dv;$$

$$\frac{n_e 2^{m+2} T^m}{\pi^{1/2}} \Gamma(m+7/2) = \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}h(v))) v^{2m} d\bar{v} - 8\pi^2 n_i \int_0^\infty f_0(v) v^{2m+5} h(v) \sigma_{tr}(v) dv.$$

Если подставить

$$g(v) = \sum_{i=0}^k \frac{A_i \pi^{3/2}}{n_e 2^i T^{i+1}} v^{2i}, \quad h(v) = \sum_{i=0}^k \frac{B_i \pi^{3/2}}{n_e 2^i T^{i+1}} v^{2i},$$

то получим линейные уравнения относительно  $A_i, B_i$

$$\Gamma(m+5/2) = \sum_{j=1}^k c_{mj} A_j, \quad \Gamma(m+7/2) = \sum_{j=1}^k c_{mj} B_j,$$

где

$$c_{mj} = \left( \frac{\pi^2}{n_e^2 2^{m+j+2} T^{m+j+1}} \int f_0(v) (\bar{v}, K(\bar{v}v^{2j})) v^{2m} d\bar{v} - \frac{\pi^4}{Z_0 n_e 2^{m+j-1} T^{m+j+1}} \int_0^\infty v^{2m+2j+5} \sigma_{tr} f_0(v) dv \right). \quad (6)$$

$$S_4 = -\frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 h(v) f_0(v) dv.$$

Коэффициенты проводимости, термоэлектричества и теплопроводности находятся из уравнений

$$\Sigma = S_1; \quad \alpha \Sigma = S_3 + \frac{\mu}{T} S_1;$$

$$\chi = S_4 + \left( \alpha - \frac{\mu}{T} \right) S_2 = S_4 + S_2 S_3 / S_4.$$

## Приближение функций полиномами

В стандартном методе Чепмена – Энскога искомая функция и правая часть уравнения Больцмана разлагаются в ряд по системе ортогональных полиномов, после чего выводится бесконечная система линейных алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов этого разложения. При численном расчете мы обрываем систему на конечном числе членов. Поэтому эквивалентный способ заключается в том, чтобы искать решение в виде многочлена с неизвестными коэффициентами соответствующей степени.

Проинтегрируем оба уравнения (5), домноженные на  $f_0 \bar{v} v^{2m}$ , получим

Решая две системы уравнений для  $m = 0, \dots, k$ , найдем соответствующие приближения для  $g(v)$  и  $h(v)$ . Для вычисления кинетических коэффициентов необходимо вычислить значения четырех интегралов. Величины  $S_i$  ( $i = 1 \dots 4$ ) выражаются через  $A_j$ ,  $B_j$  следующим образом:

$$S_1 = -\frac{4\pi}{3} \sum_{j=1}^k A_j \Gamma(j+5/2); \quad S_2 = -\frac{4\pi T}{3} \sum_{j=1}^k A_j \Gamma(j+7/2);$$

$$S_3 = \frac{4\pi}{3} \sum_{j=1}^k B_j \Gamma(j+5/2); \quad S_4 = -\frac{4\pi T}{3} \sum_{j=1}^k B_j \Gamma(j+7/2).$$

Матрица  $C$ , введенная в соотношение (6), представляет собой разность двух частей, соответствующих  $ee$  и  $ei$  взаимодействиям. Можно преобразовать  $ei$  член

$$\frac{\pi^4}{Z_0 n_e 2^{m+j-1} T^{m+j+1}} \int_0^\infty v^{2m+2j+5} \sigma_{tr}(v) f_0(v) dv = -\frac{2^{3/2} \pi^{5/2} T^{1/2}}{Z_0} \int_0^\infty x^{m+j+2} \sigma_{tr}(xT) e^{-x} dx$$

где  $\sigma_{tr}$  – транспортное сечение;  $\sigma_{tr}(E) = \int_0^\pi \sigma(\theta)(1 - \cos \theta) \sin \theta d\theta$ ;  $\sigma(\theta)$  – сечение рассеяния электрона на ионе, вы-

числяемое программой THERMOS, исходя из самосогласованного потенциала Хартри – Фока – Слэтера. Вычисление электрон-электронной части матрицы  $C$  более сложно.

Сечение упругого рассеяния электрона на электроне выражается формулой Мотта

$$\sigma(\theta, v) = \frac{1}{v^4} \left( \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} + \frac{1}{\cos^4(\theta/2)} - \frac{\cos(v^{-1} \log \operatorname{tg}^2(\theta/2))}{\sin^2(\theta/2) \cos^2(\theta/2)} \right).$$

Минимальный угол рассеяния электрона на электроне при интегрировании определяется по формуле

$$\theta_{\min} = \frac{2}{av_e} \max\left(1, \frac{1}{v_e}\right),$$

где  $a = \left(4\pi \langle Z^2 + Z \rangle n_i / T\right)^{-1/2}$  – дебаевский радиус;  $v_e$  – тепловая скорость электронов.

Для вычисления  $ee$  члена проведем ряд громоздких выкладок. Сначала рассмотрим векторную функцию  $\vec{g}(\vec{x}) = \vec{x}x^{2k}$  и преобразуем выражение

$$\vec{g}(\vec{z}/2 + a\vec{x}) + \vec{g}(\vec{z}/2 - a\vec{x}) - \vec{g}(\vec{z}/2 + a\vec{y}) - \vec{g}(\vec{z}/2 - a\vec{y}),$$

где  $a$  – положительное число;  $\vec{x}$ ,  $\vec{y}$  – единичные и  $\vec{z}$  – произвольные векторы. Сумма первых двух членов есть

$$\vec{z} \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j \text{ – четно}}} C_k^j (a(\vec{x}, \vec{z}))^j (a^2 + z^2/4)^{k-j} + 2a\vec{x} \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j \text{ – нечетно}}} C_k^j (a(\vec{x}, \vec{z}))^j (a^2 + z^2/4)^{k-j}.$$

Обозначим последнее выражение через  $\vec{R}_k \equiv \vec{R}_k(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}, a)$ . Введем также обозначение

$$J_{mk} = \int \langle \vec{v}, K(\vec{v}v^{2k}) \rangle v^{2m} f_0(v) d\vec{v},$$

где

$$K(\vec{v}v^{2k}) = \int f_0(v_1) d\vec{v}_1 \int \vec{R}_k \left( \vec{n}, \vec{n}_{\vec{v}_1 - \vec{v}}; \frac{|\vec{v}_1 - \vec{v}|}{2}; \vec{v}_1 + \vec{v} \right) |\vec{v}_1 - \vec{v}| \sigma_{ee} \left( \left( \vec{n}, \vec{n}_{\vec{v}_1 - \vec{v}} \right), |\vec{v}_1 - \vec{v}| \right) d\vec{n}.$$

Если в интеграле  $J_{mk}$  сделать замену  $\vec{u} = \vec{v}_1 - \vec{v}$ ,  $\vec{w} = \vec{v}_1 + \vec{v}$  (с якобианом 1/8), а также заметить, что для распределения Максвелла

$$f_0(v_1) f_0(v) = f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}),$$

то он переписывается в виде

$$J_{mk} = \frac{1}{2^{m+4}} \iint f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}) d\vec{u} d\vec{w} \left( (\vec{w} - \vec{u}) |\vec{w} - \vec{u}|^{2m}, \int \vec{R}_k(\vec{n}, \vec{n}_{\vec{u}}; u/2; \vec{w}) \right) u \sigma_{ee}(\vec{n}, u) d\vec{n}.$$

Для вычисления интеграла по сфере введем на ней систему координат так, чтобы

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ u \end{pmatrix}, \quad \vec{w} = \begin{pmatrix} w \sin \chi \\ 0 \\ w \cos \chi \end{pmatrix}, \quad \vec{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix}.$$

В формулу, определяющую  $\vec{R}_k$ , надо подставить

$$\vec{x} = \vec{n}; \quad \vec{y} = (0, 0, 1); \quad \vec{z} = \vec{w}; \quad a = u/2; \\ (\vec{x}, \vec{z}) = w(\cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi); \quad (\vec{y}, \vec{z}) = w \cos \chi.$$

Рассматриваемый интеграл по сфере равен

$$\begin{aligned} \vec{I} = \vec{w} \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} C_k^j u^{j+1} w^j (u^2 + w^2)^{k-j} 2^{j-2k} \times \\ \times \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left( (\cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi)^j - (\cos \chi)^j \right) \sigma_{ee}(\cos \theta, u) \sin \theta d\theta d\phi + \\ + \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} C_k^j u^{j+2} w^j (u^2 + w^2)^{k-j} 2^{j-2k} \times \\ \times \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \left( (\cos \theta \cos \chi + \sin \theta \sin \chi \cos \phi)^j - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} (\cos \chi)^j \right) \sigma_{ee}(\cos \theta, u) \sin \theta d\theta d\phi. \end{aligned}$$

Его вторая координата зануляется. Введем для натуральных  $\alpha, \beta$  обозначения

$$T_\alpha(u) = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta, u) \left( (\cos \theta)^\alpha - 1 \right) \sin \theta d\theta; \quad Q_{\alpha\beta}(u) = \int_0^\pi \sigma(\theta, u) (\cos \theta)^\alpha (\sin \theta)^{\beta+1} d\theta; \\ J_\alpha = \int_0^{2\pi} (\cos \phi)^\alpha d\phi = 2\pi \frac{(\alpha-1)!!}{\alpha!!} \times \begin{cases} 1, & \alpha - \text{четно}; \\ 0, & \alpha - \text{нечетно}. \end{cases}$$

Кроме того, для сечения Мотта  $\sigma(\theta, a)$  написанные выше интегралы расходятся при некоторых значениях  $\alpha$  и  $\beta$ .

В этих случаях интегрирование ведется не от нуля, а от  $\theta = \theta_{\min}$ . Введем еще одно обозначение

$$P_{kj}(u, w) = C_k^j u^{j+1} w^j (u^2 + w^2)^{k-j} 2^{j-2k}.$$

С использованием введенных обозначений скалярное произведение  $(\vec{u} - \vec{w}, \vec{I})$  выразится суммой

$$\begin{aligned} - \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} w(u - w \cos \chi) P_{kj}(u, w) \left( T_j(u) \cos^j \chi + \sum_{\alpha=0}^{j-1} C_j^\alpha J_{j-\alpha} Q_{\alpha, j-\alpha}(u) \cos^\alpha \chi \sin^{j-\alpha} \chi \right) - \\ - \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} u^2 P_{kj}(u, w) \left( T_{j+1}(u) \cos^j \chi + \sum_{\alpha=0}^{j-1} C_j^\alpha J_{j-\alpha} Q_{\alpha+1, j-\alpha}(u) \cos^\alpha \chi \sin^{j-\alpha} \chi \right) + \\ + \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j-\text{нечетно}}} uw P_{kj}(u, w) \left( T_{j+1}(u) \cos^{j+1} \chi + \sum_{\alpha=0}^j C_{j+1}^\alpha J_{j+1-\alpha} Q_{\alpha, j-\alpha+1}(u) \cos^\alpha \chi \sin^{j+1-\alpha} \chi \right), \end{aligned}$$

которую обозначим через  $f_{km}(u, w, \cos \chi)$ . Тогда

$$\begin{aligned} J_{mk} = \frac{1}{2^{2m+4}} \iint f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}) (u^2 + w^2 - 2uw \cos \chi)^m f_{km}(u, w, \cos \chi) d\vec{u} d\vec{w} = \\ = \frac{8\pi^2}{2^{2m+4}} \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\pi f_0(u/\sqrt{2}) f_0(w/\sqrt{2}) u^2 w^2 (u^2 + w^2 - 2uw \cos \chi)^m f_{km}(u, w, \cos \chi) dudw \sin \theta d\theta. \end{aligned}$$

После перехода к безразмерным переменным  $x = u/\sqrt{2T}$ ,  $y = w/\sqrt{2T}$  получим



$$\begin{aligned}
J_{mk} &= \frac{8\pi^2}{2^{2m+4}} \frac{n_e^2}{(2\pi T)^3} \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^\pi e^{-x^2/2} e^{-y^2/2} x^2 y^2 \times \\
&\times \left( x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi \right)^m (2T)^{m+k+9/2} f_{km}(x, y, \cos \chi) dx dy \sin \chi d\chi = \\
&= \frac{n_e^2 2^{k+1/2} (T)^{m+k+3/2}}{\pi} \tilde{J}_{mk},
\end{aligned}$$

где

$$\tilde{J}_{mk} = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^\pi e^{-x^2/2} e^{-y^2/2} x^2 y^2 \left( x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi \right)^m f_{km}(x, y, \cos \chi) dx dy \sin \chi d\chi.$$

Для вычисления  $\tilde{J}_{mk}$  разложим степени

$$\left( x^2 + y^2 - 2xy \cos \chi \right)^m = \sum_{\gamma=0}^m \sum_{\delta=0}^{m-\gamma} C_m^\gamma C_{m-\gamma}^\delta (-2)^{m-\gamma-\delta} \chi x^{m+\gamma-\delta} y^{m+\delta-\gamma}; \quad P_{kj}(x, y) = \sum_{\beta=0}^{k-j} C_k^j C_{k-j}^\beta 2^{j-2k} x^{1+j+2\beta} y^{2k-2\beta-j}.$$

Отметим также, что

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty y^a e^{-y^2/2} dy &= \int_0^\infty (2z)^{(a-1)/2} e^{-z} dz = 2^{(a-1)/2} \Gamma((a+1)/2); \\
S(a, b) &= \int_0^\pi \cos^a \chi \sin^{b+1} \chi = \int_{-1}^1 x^a (1-x^2)^{b/2} dx = \\
&= \begin{cases} 0 & \text{при нечетном } a; \\ \int_0^1 z^{(a-1)/2} (1-z)^{b/2} dz = B\left(\frac{a+1}{2}, \frac{b}{2}+1\right) & \text{при четном } a. \end{cases}
\end{aligned}$$

Введем для  $a > -1$  и натуральных  $i, j$  обозначения

$$\tau(a, j) = \int_0^\infty x^a T_j(\sqrt{2mTx}) e^{-x^2/2} dx; \quad q(a, i, j) = \int_0^\infty x^a Q_{i,j}(\sqrt{2mTx}) e^{-x^2/2} dx.$$

С использованием этих величин можно записать

$$\tilde{J}_{mk} = -F_1 + F_2 - F_3 + F_4 - F_5 + F_6 - F_7 + F_8,$$

где каждая из величин  $F$  представляет собой многократную сумму, например,

$$\begin{aligned}
F_1 &= \sum_{\substack{0 \leq j \leq k \\ j \text{ - четно}}}^{k-j} \sum_{\beta=0}^m \sum_{\gamma=0}^{m-j} C_k^j C_{k-j}^\beta 2^{j-2k} C_m^\gamma C_{m-\gamma}^\delta (-2)^{m-\gamma-\delta} \times \\
&\times 2^{2+m+\delta-\gamma+2k-2\beta-j} \Gamma\left(\frac{4+m+\delta-\gamma+2k-2\beta-j}{2}\right) \times \\
&\times S(j+m-\gamma-\delta; 0) \tau(4+m+\gamma-\delta+j+2\beta; j).
\end{aligned}$$

Несмотря на громоздкость полученного выражения, оно хорошо подходит для численных расчетов величины  $\tilde{J}_{mk}$ . Через величину  $\tilde{J}_{mk}$  ее часть матрицы  $S$  выразится следующим образом

$$\frac{\pi T^{1/2}}{2^{m+3/2}} \tilde{J}_{mk}.$$

Полное выражение

$$c_{mk} = \frac{\pi T^{1/2}}{2^{m+3/2}} \tilde{J}_{mk} - \frac{2^{3/2} \pi^{5/2} T^{1/2}}{Z_0} \int_0^\infty x^{m+j+2} \sigma_{tr}(xT) e^{-x} dx.$$

## Лоренцева плазма

Плазма, в которой  $ee$  столкновениями можно пренебречь по сравнению с  $ei$  столкновениями, называется лоренцевой. В случае лоренцевой плазмы интегральный оператор  $K$  можно считать равным нулю. Получившееся

уравнение Больцмана можно решать двумя разными способами. Первый – просто найти неизвестные функции  $g$ ,  $h$  по формулам

$$g(v) = -(2\pi T \sigma_{tr}(v) v n_i)^{-1}; \quad h(v) = -\frac{v}{4\pi T^2 \sigma_{tr}(v) n_i}.$$

В этом случае коэффициенты  $S_i$  выражаются так:

$$S_1 = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^4 \frac{1}{2\pi T \sigma_{tr}(v) v n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = \frac{2^{1/2} Z_0}{3\pi^{3/2} T^{1/2}} \int_0^\infty \frac{x}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx; \quad (8)$$

$$S_2 = \frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 \frac{1}{2\pi T \sigma_{tr}(v) v n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = \frac{2^{1/2} Z_0 T^{1/2}}{3\pi^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^2}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx; \quad (9)$$

$$S_3 = -\frac{4\pi}{3} \int_0^\infty v^5 \frac{1}{4\pi T^2 \sigma_{tr}(v) n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = -\frac{2^{1/2} Z_0}{3\pi^{3/2} T^{1/2}} \int_0^\infty \frac{x^2}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx; \quad (10)$$

$$S_4 = \frac{2\pi}{3} \int_0^\infty v^6 \frac{v}{4\pi T^2 \sigma_{tr}(v) n_i} \frac{n_e}{(2\pi T)^{3/2}} e^{-v^2/2T} dv = \frac{2^{1/2} Z_0 T^{1/2}}{3\pi^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^3}{\sigma_{tr}(xT)} e^{-x} dx. \quad (11)$$

Второй путь – решать полученное неинтегральное уравнение как интегральное, считая, что в матрице  $C$  электрон-электронная часть зануляется. Эти подходы дадут разные результаты, отличие будет тем сильнее, чем хуже  $\sigma_{tr}^{-1}$  приближается полиномами.

Вместо экранированного потенциала можно взять кулоновский (с зарядом ядра  $Z_0$  средней степени ионизации). В этом случае интеграл для транспортного сечения расходится [3], и его необходимо обрезать по углу, определяемому по дебаевскому радиусу. В выражения для  $S_i$  нужно подставить

$$\sigma_{tr}(E) = \frac{Z_0 L}{2E^2},$$

где

$$L = \ln \left( \min \left( \frac{\sqrt{2T}}{Z_0}, 1 \right) \frac{T}{\sqrt{2\pi n_i (Z_0 + Z_0^2)}} \right).$$

В этом случае

$$S_1 = \frac{4\sqrt{2}T^{3/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}; \quad S_2 = \frac{16\sqrt{2}T^{5/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}; \quad S_3 = -\frac{16\sqrt{2}T^{3/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}; \quad S_4 = \frac{80\sqrt{2}T^{5/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}.$$

Отсюда получаем, что

$$\Sigma = S_1, \quad \chi = \frac{16\sqrt{2}T^{5/2}}{\pi^{3/2}Z_0L}.$$

Отметим, что все формулы с кулоновскими логарифмами применимы лишь в случае  $L \gg 1$ .

## Результаты расчетов

В таблицах приведены результаты расчетов электропроводности  $\Sigma$  и теплопроводности  $\chi$  для различных веществ при различных плотностях и температурах. В колонке "С учетом  $ee$ " приводятся результаты расчетов с учетом неидеальности за счет рассеивания на самосогласованном потенциале Хартри – Фока, вычисляемом программой THERMOS с учетом  $ee$ -взаимодействия. В колонке "Лоренц-I" приводятся результаты без учета  $ee$ -взаимодействия. В колонке "Лоренц-II" приводятся результаты расчетов кинетических коэффициентов по формулам (8)–(11). В колонке "Кулон без  $ee$ " приводятся значения кинетических коэффициентов для кулоновского поля с обрезанием (кулоновскими логарифмами). В колонке "Кулон с  $ee$ " приводятся значения коэффициентов с учетом  $ee$ -столкновений.

Таблица 1

Значения кинетических коэффициентов при различных степенях аппроксимирующих полиномов для H,  $T = 1$  кэВ,  $\rho = 1$  г/см<sup>3</sup>

Степень	$\Sigma, \chi$	С учетом $ee$	Лоренц-I	Лоренц-II	Кулон без $ee$	Кулон с $ee$
2	$\Sigma$	52,761	80,661	81,889	63,726	40,02
	$\chi$	1686,744	2736,473	11589,198	9368,029	1019,067
3	$\Sigma$	50,434	81,833	81,889	63,726	38,407
	$\chi$	7075,336	11239,603	11589,198	9368,029	6193,406
4	$\Sigma$	51,509	81,878	81,889	63,726	39,283
	$\chi$	7184,746	11569,115	11589,198	9368,029	6334,059
5	$\Sigma$	51,912	81,885	81,889	63,726	39,559
	$\chi$	7254,13	11584,247	11589,198	9368,029	6411,43

Таблица 2

Значения кинетических коэффициентов при различных степенях аппроксимирующих полиномов для Na,  $T = 1$  кэВ,  $\rho = 1$  г/см<sup>3</sup>

Степень	$\Sigma, \chi$	С учетом $ee$	Лоренц-I	Лоренц-II	Кулон без $ee$	Кулон с $ee$
2	$\Sigma$	1,362	1,367	4,165	7,439	6,693
	$\chi$	12,439	12,468	247,635	1093,678	150,452
5	$\Sigma$	3,493	3,593	4,165	7,439	6,958
	$\chi$	196,728	200,37	247,635	1093,678	1066,585
6	$\Sigma$	3,871	4,003	4,165	7,439	6,957
	$\chi$	198,006	203,488	247,635	1093,678	1066,775
7	$\Sigma$	3,88	4,009	4,165	7,439	6,956
	$\chi$	227,032	229,422	247,635	1093,678	1066,645
8	$\Sigma$	3,947	4,069	4,165	7,439	6,958
	$\chi$	245,165	246,533	247,635	1093,678	1066,525
9	$\Sigma$	4,025	4,146	4,165	7,439	6,958
	$\chi$	245,189	246,75	247,635	1093,678	1066,463

Таблица 3

Значения кинетических коэффициентов для W при различных температурах и плотностях (степень аппроксимирующего полинома 5)

T	$\rho$		С учетом $ee$	Лоренц -I	Лоренц -II	Кулон без $ee$	Кулон с $ee$
$10^{-2}$	$10^{-3}$	$\Sigma$	4,96e-03	4,98e-03	5,03e-03	-1,12e-03	-1,13e-03
		$\chi$	6,84e-03	7,07e-03	7,24e-03	-1,66e-03	-1,66e-03
$10^{-1}$	$10^{-3}$	$\Sigma$	4,15e-02	4,20e-02	4,20e-02	3,45e-01	3,05e-01
		$\chi$	5,77e-01	5,801e-01	5,803e-01	5,081	4,841
1	$10^{-3}$	$\Sigma$	7,14e-01	7,23e-01	7,23e-01	9,32e-01	9,15e-01
		$\chi$	1,01e+01	1,015e+01	1,016e+01	1,370e+02	1,360e+02
$10^{-2}$	$10^{-2}$	$\Sigma$	1,57e-02	1,579e-02	1,585e-02	-8,259e-04	-8,259e-04
		$\chi$	1,66e-02	1,662e-02	1,680e-02	-1,214e-03	-1,213e-03
$10^{-1}$	$10^{-2}$	$\Sigma$	5,49e-02	5,545e-02	5,561e-02	-1,35e-01	-1,39e-01
		$\chi$	7,43e-01	7,468e-01	7,535e-01	-1,986	-2,006
1	$10^{-2}$	$\Sigma$	8,49e-01	8,59e-01	8,59e-01	1,346	1,319
		$\chi$	1,19e+02	1,20e+02	1,20e+02	1,979e+02	1,965e+02
$10^{-2}$	$10^{-1}$	$\Sigma$	7,83e-01	7,834e-02	8,24e-02	-6,509e-04	-6,509e-04
		$\chi$	5,54e-02	5,54e-02	5,95e-02	-9,569e-04	-9,563e-04
$10^{-1}$	$10^{-1}$	$\Sigma$	6,48e-02	6,495e-02	6,756e-02	-5,65e-02	-5,68e-02
		$\chi$	1,111	1,115	1,133	-8,307e-01	-8,314e-01

$T$	$\rho$		С учетом $ee$	Лоренц -I	Лоренц -II	Кулон без $ee$	Кулон с $ee$
1	$10^{-1}$	$\Sigma$	1,035	1,045	1,045	2,398	2,337
		$\chi$	1,44e+02	1,448e+02	1,448e+02	3,52e+02	3,49e+02
$10^{-2}$	1	$\Sigma$	4,70e-01	4,70e-01	4,71e-01	-5,37e-04	-5,37e-04
		$\chi$	2,81e-01	2,81e-01	2,83e-01	-7,89e-04	-7,89e-04
$10^{-1}$	1	$\Sigma$	1,547e-01	1,547e-01	1,56e-01	-3,57e-02	-3,57e-02
		$\chi$	2,182	2,182	2,216	-5,25e-01	-5,24e-01
1	1	$\Sigma$	1,309	1,318	1,318	1,093e+01	1,016e+01
		$\chi$	1,804e+02	1,810e+02	1,810e+02	1,60e+03	1,56e+03
$10^{-2}$	10	$\Sigma$	1,457	1,457	1,456	-4,57e-04	-4,57e-04
		$\chi$	1,155	1,155	1,157	-6,72e-04	-6,71e-04
$10^{-1}$	10	$\Sigma$	5,30e-01	5,30e-01	5,37e-01	-2,61e-02	-2,61e-02
		$\chi$	5,49	5,49	5,63	-3,83e-01	-3,83e-01
1	10	$\Sigma$	1,487	1,490	1,500	-4,27	-4,32
		$\chi$	1,08e+02	1,08e+02	1,31e+02	-6,28e+02	-6,29e+02

Замечание к табл. 3. Нефизические (отрицательные) значения проводимостей, вычисленные по спитцеровским формулам, приведены для того, чтобы показать, что использование кулоновских логарифмов теряет область своей применимости, тогда как использование самосогласованного потенциала не приводит к нефизическим результатам.

Таблица 4

Значения кинетических коэффициентов для Be при различных температурах и плотностях (степень аппроксимирующего полинома 5)

$T$	$\rho$		С учетом $ee$	Лоренц -I	Лоренц -II	Кулон без $ee$	Кулон с $ee$
0,5	$10^{-2}$	$\Sigma$	3,423	4,328	4,342	3,836	3,143
		$\chi$	2,70e+02	3,011e+02	3,043e+02	2,819e+02	2,559e+02
0,5	$10^{-1}$	$\Sigma$	2,6	2,94	3,61	4,92	4,04
		$\chi$	1,78e+02	1,82e+02	2,81e+02	3,62e+02	3,28e+02
0,5	1	$\Sigma$	5,51	6,51	6,51	6,88	5,632
		$\chi$	4,16e+02	4,58e+02	4,60e+02	5,063e+02	4,57e+02
0,5	10	$\Sigma$	7,308	8,3546	8,3550	1,14e+01	9,262
		$\chi$	5,46e+02	5,89e+02	5,89e+02	8,42e+02	7,55e+02
0,5	$10^2$	$\Sigma$	1,059e+01	1,15e+01	1,15e+01	3,277e+01	2,50e+01
		$\chi$	7,69e+02	8,054e+02	8,054e+02	2,40e+03	2,07e+03
1	1	$\Sigma$	1,23e+01	1,48e+01	1,52e+01	1,57e+01	1,29e+01
		$\chi$	8,43e+02	9,7e+02	1,29e+03	2,31e+03	2,09e+03

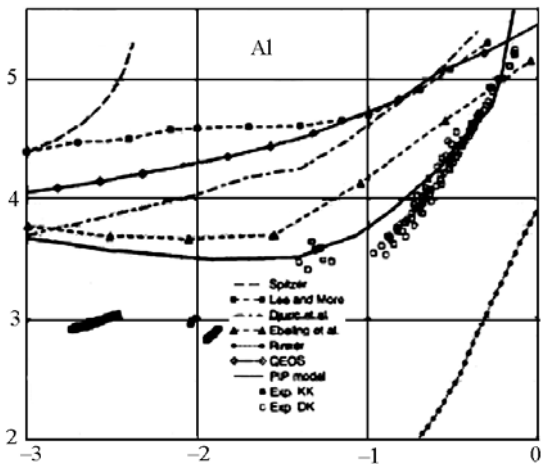


Рис. 1. Зависимость коэффициента электропроводности от плотности при  $T = 10000$  К. Теоретические и экспериментальные данные [11]

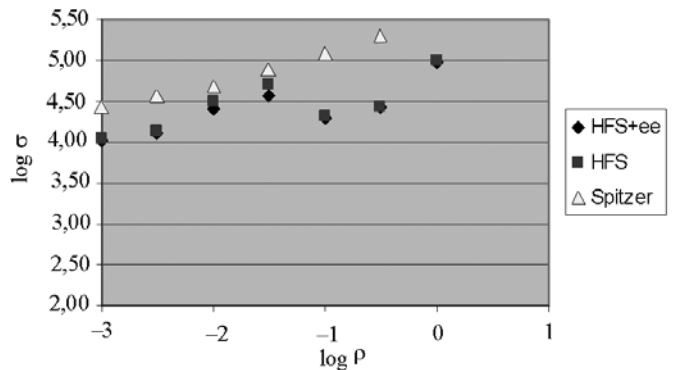


Рис. 2. Зависимость коэффициента электропроводности Al при  $T = 10000$  К от плотности. Использован самосогласованный потенциал Хартри – Фока – Слэтера

На рис. 1, 2 приведены экспериментальные и теоретические кривые зависимости проводимости от плотности. Эксперимент показывает немонотонную зависимость коэффициента проводимости. На рис. 2 эта немонотонность хорошо видна. Большинство же теоретических моделей предсказывают монотонную зависимость, что находится в противоречии с экспериментом.

## Обсуждение результатов

Из полученных результатов следует вывод, что влияние потенциала на кинетические коэффициенты плазмы не так очевидно, как это может показаться на первый взгляд. Простой вывод, что экранировка потенциала приводит к уменьшению сечения, а следовательно, к увеличению транспортных коэффициентов плазмы по сравнению с незэкранированным потенциалом, оказывается несостоятельным. При некоторых значениях параметров плазмы наблюдается противоположный эффект. Выполненные расчеты позволяют сделать следующие выводы:

1. При учете рассеяния электронов на самосогласованном потенциале Хартри – Фока – Слэтера, кинетические коэффициенты плазмы заметно отличаются от соответствующих результатов, полученных для чисто кулоновской плазмы в работах Спитцера [6], Брагинского [5] и многих других работах (см. ссылки на литературу в работе [10]).

2. Эти результаты согласуются с данными, полученными в работе [9], в которой для вычисления транспортных коэффициентов также использовались потенциалы Хартри – Фока – Слэтера, а для расчета кинетических коэффициентов использовалось простое приближение времени релаксации. К сожалению, в этом случае нельзя корректно учесть вклад  $ee$ -рассеяния, которое дает существенный вклад для ионов с малыми  $Z$ .

3. Выполненные расчеты кинетических коэффициентов с реальными потенциалами и их сравнение с соответствующими результатами для кулоновских потенциалов показывают, что одного учета дебаевского экранирования недостаточно для правильного расчета транспортных коэффициентов. Чисто дебаевские потенциалы использовались для вычисления транспорт-

ных коэффициентов плазмы Калиткиным [7] и, как показано в его докторской диссертации, позволяют сильно упростить процедуру Чепмена – Энскога по сравнению с нашим случаем произвольных потенциалов. Этот подход, по-видимому, имеет свою, достаточно узкую область применимости для разреженной плазмы с небольшими значениями  $Z$ , которую можно определить при проведении более массовых расчетов.

## Список литературы

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Физматлит, 2001.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2001.
3. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. М.: Физматлит, 2001.
4. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.-СПб.: Физматлит-Невский-Диалект-Лаборатория Базовых Знаний, 2001.
5. Брагинский С. И. Явления переноса в плазме // Сборник "Вопросы теории плазмы" / Под ред. М. А. Леонтовича. Вып. 1. М.: Атомиздат, 1963. С. 183–272.
6. Спитцер Л. Физика полностью ионизованного газа. М.: ИИЛ, 1957.
7. Калиткин Н., Кузьмина Л., Рогов В. Таблицы термодинамических функций и транспортных коэффициентов плазмы. Препринт. М.: ИПМ, 1972.
8. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: Физматлит. 2000.
9. Rinker G. Systematic calculations of plasma transport coefficients for the Periodic Table // Phys. Rev. A. Vol. 37, № 4. P. 1284–1297.
10. Eppelrein E., Haines M. Plasma transport coefficients in a magnetic field by direct numerical solution of the Fokker-Planck equation // Phys. Fluids. 1986. Vol. 29, № 4. P. 1029–1041.
11. DeSilva A. W., Katsouros J. D. Phys. Rev. 1998. Vol. E 57. P. 5945.

Статья поступила в редакцию 03.09.2008.

## **ВИХРЕВАЯ ПОДСЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ**

**В. Г. Морозов, Б. М. Жогов, С. А. Савельев, В. Б. Титова**

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Предлагается новая модель для двумерных расчетов перемешивания. Рассматривается перемешивание тяжелых струй, проникающих в легкую среду. Первичные струи рассчитываются прямым численным моделированием. Выводятся двумерные уравнения перемешивания струй в предположении, что оно происходит за счет возникающих поперечных вихрей (ось вращения которых перпендикулярна плоскости течения). Модель внедрена в двумерный газодинамический комплекс "Медуза". В статье приведены результаты тестового расчета модельного опыта Е. Е. Мешкова по обтеканию воздухом "тяжелого" угла.

### **Введение**

Многолетние исследования показали, что в развитии турбулентности определяющую роль играют начальные возмущения, развивающиеся в условиях газодинамической неустойчивости. Они определяют анизотропный характер вихревого течения. Последние достижения в технике и методах многомерных газодинамических расчетов создали реальную возможность прямого численного моделирования развития первичных возмущений в наших прикладных расчетах. Результаты этих расчетов показали, что даже небольшие возмущения в начальных условиях или на границах могут существенно влиять на характерную картину сжатия, особенно при сферической кумуляции. На границе области возникают струи, которые при схождении к центру приводят к интенсивному перемешиванию веществ соседних слоев.

Если процесс рождения и схождения струй доступен прямому численному моделированию, то для расчета дальнейшего их размытия и перемешивания ресурсов современных ЭВМ недостаточно. Здесь необходимо введение эффективных и физически обоснованных моделей. В качестве такой модели предлагается вихревая модель турбулентности. Идея близка к идее метода "больших вихрей".

### **1. Основные положения модели**

Анализ экспериментальных и расчетных данных показывает, что зарождение и развитие турбулентности на первой сильно анизотропной стадии происходит в следующем порядке:

- 1) рост начальных возмущений, развитие струй;
- 2) рождение ими поперечных вихрей вследствие тангенциальной неустойчивости на границах струй;
- 3) потеря устойчивости поперечных вихрей и распад их на продольные вихри.

В зависимости от конкретных условий может преобладать тот или иной этап.

В интересном для нас случае сильно выражен первый этап – рождение и распространение струй.

Второй существенный этап начинается, когда среда, в которой распространяются струи, становится достаточно плотной, чтобы тормозить и размывать струи через образование поперечных вихрей на их поверхности за счет сдвиговой неустойчивости.

Третий этап – трансформация поперечных вихрей в продольные вихревые нити (так называемая развитая турбулентность) – слабо выражен, так как перемещения вещества здесь малы (происходит остановка границ). Поэтому основное вихревое "перемешивание" происходит на втором этапе. Это позволяет сделать разумное предположение, сильно упрощающее построение модели: при расчете вихревого течения рассматриваем только поперечные вихри.

### **2. Уравнение газодинамики поперечных вихрей**

Цель работы – построить уравнения кинетики вихрей для среды, примыкающей к границам веществ, т. е. уравнения для рождения и распространения вихрей и на их основе вывод уравнений перемешивания струй со средой. Уравнения надо строить в виде, удобном для перехода к разностному счету, т. е. с разделением ве-

щества на ячейки и составлением уравнений для каждой ячейки и уравнения для их связи. Согласно сделанному предположению, продольный перенос массы в основном осуществляется проникающей струей, а поперечный перенос – вихрями. Здесь мы приведем вывод уравнений для поперечных вихрей в общей векторной форме. Уравнения газодинамики удобно записать в эйлеровых координатах, выделив явно поперечную составляющую ускорения

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \vec{V} \nabla \vec{V} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \nabla \frac{V^2}{2} - [\vec{V} \times \vec{\omega}] = -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (1)$$

где  $\vec{\omega} = \text{rot } \vec{V}$ .

Член в левой части уравнения  $\vec{a}_d = -[\vec{V} \times \vec{\omega}]$  представляет поперечное ускорение. Оно перпендикулярно  $\vec{V}$ . В случае двумерного течения  $\vec{\omega} \perp \vec{V}$  и  $[\vec{V} \times \vec{\omega}]$  лежит в плоскости течения.

Применяя оператор  $\text{rot}$  к обеим частям уравнения (1), получаем уравнение для  $\vec{\omega}$

$$\frac{\partial \vec{\omega}}{\partial t} = \text{rot } \vec{a}_d + \text{rot} \left( -\frac{1}{\rho} \nabla p \right). \quad (2)$$

Оба члена в правой части имеют простой физический смысл:  $\text{rot } \vec{a}_d = \text{rot} [\vec{V} \times \vec{\omega}]$  это изменение  $\omega$  в данной точке за счет переноса,  $\text{rot} \left( -\frac{1}{\rho} \nabla p \right)$  – это источник  $\omega$  за счет завихрения среднего потока вследствие бароклинного поля ускорений.

Последний член можно еще представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \text{rot} \left( -\frac{1}{\rho} \nabla p \right) &= \text{rot} \left( \nabla \left( -\frac{1}{\rho} p \right) \right) + \text{rot} \left( p \nabla \frac{1}{\rho} \right) = \\ &= \text{rot} \left( p \nabla \frac{1}{\rho} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

В случае смеси веществ

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{c_i}{\rho_i},$$

где  $\rho_i$  – парциальная плотность каждой компоненты смеси,  $c_i$  – относительная массовая концентрация компоненты.

Теперь

$$\text{rot} \left( p \nabla \frac{1}{\rho} \right) = \text{rot} \left( p \sum \frac{\nabla c_i}{\rho_i} \right) + \text{rot} \left( p \sum \left( c_i \nabla \frac{1}{\rho_i} \right) \right). \quad (4)$$

Для изоэнтропического течения

$$\text{rot} \left( p \sum \left( c_i \nabla \frac{1}{\rho_i} \right) \right) = \sum \text{rot} (c_i \nabla w_i) = \sum [\nabla c_i \times \nabla w_i]. \quad (5)$$

До сих пор выкладки состояли из тождественных преобразований. Здесь мы сделаем допущение, что членом  $\sum \text{rot} (c_i \nabla w_i)$  можно пренебречь. Это означает, что вклад в образование вихрей дают в основном пере-

пады плотности на границе веществ с тангенциальным разрывом скоростей, как в несжимаемой жидкости.

В общем случае

$$\frac{\partial \vec{\omega}}{\partial t} = \text{rot } \vec{a}_d + \text{rot} \left( \sum p \nabla \frac{c_i}{\rho_i} \right). \quad (6)$$

### 3. Вывод уравнений для скорости дрейфа

Уравнение Эйлера и уравнение для завихренности, которое получается из него, следующие:

– уравнение Эйлера в лагранжевых координатах

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p; \quad (7)$$

– уравнение Эйлера в эйлеровых координатах

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + \frac{\nabla V^2}{2} - [\vec{V} \times \vec{\omega}] = -\frac{1}{\rho} \nabla p, \quad (\vec{\omega} = \text{rot } \vec{V}); \quad (8)$$

– уравнение для завихренности  $\vec{\omega} = \text{rot } \vec{V}$  в лагранжевых координатах

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \frac{\vec{\omega}}{\rho} &= \left( \frac{\partial}{\partial t} \frac{\vec{\omega}}{\rho} + \vec{V} \nabla \frac{\vec{\omega}}{\rho} \right) = \frac{1}{\rho} \text{rot} \left( -\frac{1}{\rho} \nabla p \right) \approx \\ &\approx \frac{1}{\rho} \text{rot} \left( p \left( \frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \nabla c \right). \end{aligned} \quad (9)$$

Далее будем обозначать  $-\frac{1}{\rho} \nabla p = \vec{A}$ .

Здесь рассматривается смесь из двух веществ с массовыми концентрациями  $c$  и  $1-c$ . При этом выполняется  $\frac{1}{\rho} = \frac{c}{\rho_1} + \frac{1-c}{\rho_2}$ ,  $\rho_1$  и  $\rho_2$  – плотности веществ при давлении  $p$ ;

– уравнение для завихренности в эйлеровых координатах

$$\frac{\partial \vec{\omega}}{\partial t} - \text{rot} [\vec{V} \times \vec{\omega}] = \text{rot} \left( p \left( \frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2} \right) \nabla c \right) = \text{rot } \vec{A}. \quad (10)$$

Проанализируем уравнение (9). Оператор в левой части имеет смысл переноса величины  $\frac{\vec{\omega}}{\rho}$  вместе с фиксированной лагранжевой координатой. При  $\text{rot } \vec{A} = 0$  он равен 0. Это есть дифференциальное выражение закона сохранения циркуляции – завихренность сохраняется и переносится вместе с массой, в которую она "вморожена". То есть если происходит перемешивание веществ, то каждая компонента переносит свою завихренность. Таким образом, турбулентное перемешивание гетерогенно и происходит путем дробления каждой компоненты и перемешивания их между собой. Это положение известно. Мы его приводим здесь для облегчения дальнейших построений.

Можно сказать и обратное, что уравнение для перемешивания аналогично уравнению для переноса за-

вихренности  $\frac{\bar{\omega}}{\rho}$ . Появление  $\text{rot } \bar{A}$  в правой части озна-

чает, что, с одной стороны, появляется источник завихренности, а с другой – возникает перенос ее относительно массы, завихренность уже не "вморожена" в среду, а происходит ее диффузия. Этот поток вихрей порождает потоки каждой компоненты, которые и дают перемешивание. Для численного определения переноса

$\frac{\bar{\omega}}{\rho}$  и перемешивания необходимо решать совместно

уравнения (7) или (8) и уравнение (9) или (10). В уравнении (8) в левой части явно выражена потенциальная и вихревая часть ускорения. Потенциальное ускорение изменяет модуль скорости, вихревая часть поворачивает вектор скорости, не меняя его величины, т. е. не изменяя энергии. Нас интересует вихревая часть, содержащая  $\bar{\omega}$ , так как она создает дрейфовый перенос.

Из уравнения (9) следует, что дрейфовая скорость возникает при наличии  $\text{rot}\left(-\frac{1}{\rho}\nabla p\right) =$

$$= \text{rot}\left(p\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right)\nabla c\right), \text{ т. е. градиента } \frac{1}{\rho} \text{ или градиента}$$

концентраций разноплотных компонентов.

Построим феноменологическую систему уравнений для нахождения скорости дрейфа.

Так как  $\frac{d\bar{\omega}}{dt} = \text{rot } \bar{A}$ , из соображений размерности

$$\bar{\omega} = \int \text{rot } \bar{A} \cdot dt \sim \frac{\overline{\text{rot } \bar{A}}}{\omega}, \text{ где } \overline{\text{rot } \bar{A}} \text{ – среднее значение ро-}$$

тора ускорения за период вращения вихря. Будем считать его равным среднему значению в квазистационарном приближении. Это разумно, так как мелкомасштабное перемешивание осуществляется мелкомасштабными вихрями.

Из уравнения (8) среднее ускорение вихря равно

$$\overline{A_{\text{др}}} = -\bar{V} \times \bar{\omega} = -\frac{\bar{V} \times \text{rot}\left(p\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right)\nabla c\right)}{\omega}. \quad (11)$$

Средняя скорость дрейфа в квазистационарном приближении есть

$$\int \bar{A}_{\text{др}} dt = \frac{\bar{A}_{\text{др}}}{\omega} = -\frac{\bar{V} \times \text{rot } \bar{A}}{\omega^2} \quad (12)$$

или в векторном виде

$$\bar{U}_{\text{др}} = -\frac{\bar{V} \times \text{rot}\left(p\left(\frac{1}{\rho_1} - \frac{1}{\rho_2}\right)\nabla c\right)}{\omega^2}. \quad (13)$$

Выражение для скорости дрейфа можно получить более наглядным способом. Осцилляция скорости представляется как результат вращения переменной ее

части. Средняя по периоду вращения поперечная составляющая скорости есть

$$V_{\text{др}} = \frac{1}{T} \int_0^T U \sin(\varphi) dt,$$

где  $\varphi = \omega_0 t + \frac{\dot{\omega}_0 t^2}{2}$ ,  $\dot{\omega} = \text{rot } A$ .

Перейдем к переменной  $\varphi$

$$V_{\text{др}} \sim \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\sin \varphi d\varphi}{\sqrt{1 + \frac{2\dot{\omega}_0}{\omega_0^2} \varphi}}$$

или в векторном виде

$$\bar{V}_{\text{др}} \approx \alpha \frac{V \times \left[ \nabla p \times \nabla \frac{1}{\rho} \right]}{1 + 4 \left( \frac{2\dot{\omega}}{\omega^2} \right)^2} \frac{1}{\omega^2}.$$

Конечно, в формулу для скорости дрейфа входит коэффициент  $\alpha$  (один для модели), который находится из тестовых расчетов.

#### 4. Уравнения для потока массы и потока концентраций

Преобразуем полученные выражения для найденной скорости дрейфа

$$\bar{U}_{\text{др}} = -\frac{\bar{V} \times \text{rot}\left(p \sum \frac{1}{\rho_i} \nabla c_i\right)}{\omega^2}.$$

Отсюда находим плотность потока массы

$$\bar{J} = \bar{U}_{\text{др}} \rho = \sum \bar{J}_i, \text{ где } \bar{J}_i = -\frac{\bar{V} \times \text{rot}\left(p \frac{1}{\rho_i} \nabla c_i\right)}{\omega^2} \rho. \quad (14)$$

То есть полный поток массы равен сумме потоков масс компонент. Отсюда получаем уравнение для плотности потока переноса массовых концентраций

$$\bar{j}_i = \frac{\bar{J}_i}{\rho} = -\frac{\bar{V} \times \text{rot}\left(p \frac{1}{\rho_i} \nabla c_i\right)}{\omega^2} = -\frac{\bar{V} \times \left( \nabla \frac{p}{\rho_i} \times \nabla c_i \right)}{\omega^2}. \quad (15)$$

( $J_i$  имеет размерность скорости).

То есть поток  $i$ -й компоненты пропорционален градиенту соответствующей концентрации.

Скорость дрейфа является частью полной скорости  $\bar{V}$ , поэтому уравнения, куда входит полная скорость, сохраняются. Меняются только уравнения, куда явно входит скорость дрейфа.



## 5. Общая система уравнений

### 5.1. Уравнение переноса массы

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \vec{V} = 0 \quad \text{– в эйлеровых координатах; (16)}$$

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \vec{V} = 0 \quad \text{– в лагранжевых координатах; (17)}$$

$$\left( \frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \rho \right).$$

### 5.2. Уравнение переноса концентрации (уравнение перемешивания)

Введенная скорость дрейфа каждой компоненты

$$\vec{U}_{\text{др}i} = \frac{\vec{j}_i}{\rho}$$

складывается с полной скоростью за вычетом полной скорости дрейфа  $\vec{U}_{\text{др}}$ , так что полный поток

$i$ -й компоненты есть

$$\rho(c_i \vec{V} + \vec{j}_i - c_i \vec{U}_{\text{др}}).$$

Таким образом,

$$\frac{\partial \rho c_i}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \rho(c_i \vec{V} + \vec{j}_i - c_i \vec{U}_{\text{др}}) \right) = 0 \quad \text{– в эйлеровых координатах; (18)}$$

$$\rho \frac{dc_i}{dt} + \operatorname{div} \left( \rho(\vec{j}_i - c_i \vec{U}_{\text{др}}) \right) = 0 \quad \text{– в лагранжевых координатах; (19)}$$

$$\text{где } \frac{dc_i}{dt} = \frac{\partial c_i}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) c_i; \quad \vec{j}_i = - \frac{\vec{V} \times \left[ \nabla \frac{p}{\rho_i} \times \nabla c_i \right]}{\omega^2}.$$

### 5.3. Выражение для тензора плотности потока вектора $\rho U$ (импульса дрейфа). Уравнение Эйлера

В главе 1 определили скорость дрейфа в виде

$$U_{\text{др}x} = -V_y \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2};$$

$$U_{\text{др}y} = V_x \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2}.$$

Тогда компоненты тензора такие:

$$\Pi = \begin{pmatrix} \Pi_{xx} & \Pi_{xy} \\ \Pi_{yx} & \Pi_{yy} \end{pmatrix} = \rho \begin{pmatrix} U_{\text{др}x} V_x & U_{\text{др}x} V_y \\ U_{\text{др}y} V_x & U_{\text{др}y} V_y \end{pmatrix}. \quad (19)$$

$$\Pi_{yx}^{\text{др}} = \rho U_{\text{др}y} V_x = \rho V_x^2 \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2};$$

$$\Pi_{xy}^{\text{др}} = \rho U_{\text{др}x} V_y = -\rho V_y^2 \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2};$$

$$\Pi_{xx}^{\text{др}} = \rho U_{\text{др}x} V_x = -\rho V_y V_x \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2};$$

$$\Pi_{yy}^{\text{др}} = \rho U_{\text{др}y} V_y = \rho V_y V_x \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2}.$$

В уравнение Эйлера в правой части добавится член, содержащий  $\Pi^{\text{др}}$ , т. е.

$$\frac{dV_x}{dt} = \frac{\partial V_x}{\partial t} + \vec{V} \nabla V_x = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho V_y^2 \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho V_x V_y \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2} \right); \quad (20)$$

$$\frac{dV_y}{dt} = \frac{\partial V_y}{\partial t} + \vec{V} \nabla V_y = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho V_x^2 \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho V_x V_y \frac{\operatorname{rot}_z \vec{A}}{\omega^2} \right). \quad (21)$$

Таким образом, наличие дрейфа приводит к возникновению девиаторных членов в тензоре потока импульса и сил "трения" при сдвиговом течении, подобных вязким силам. Подчеркнем, что этот эффект есть следствие неоднородности  $\vec{\omega}$  в пространстве (наличие  $\operatorname{rot} \vec{A}$ ), а не просто наличия  $\vec{\omega}$ . Например, при течении с постоянным сдвигом  $V_y \sim \omega x$  существует

$\omega = \frac{\partial V_y}{\partial x} = \text{const}$ , но вихревая вязкость отсутствует.

При  $\omega = \text{const}$  вихревое ускорение  $-\left[ \vec{V} \times \vec{\omega} \right]$  направлено перпендикулярно  $\vec{V}$  и не меняет кинетической энергии вихревого течения, но при появлении скорости дрейфа возникающее вихревое "трение" перекачивает энергию в кинетическую вихревую энергию дрейфа

$E_{\text{др}} = \frac{U_{\text{др}}^2}{2} = \frac{1}{2} V^2 \left( \frac{\operatorname{rot} \vec{A}}{\omega^2} \right)^2$ . В квазистационарном приближении энергия дрейфа в результате вязкой диссипации переходит в тепловую с такой же интенсивностью.

### 5.4. Уравнение сохранения энергии

Уравнение для внутренней энергии

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \varepsilon = -\frac{p}{\rho} \operatorname{div} (\vec{V} - \vec{U}_{\text{др}}) - \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \left( \rho(\vec{V}_\varepsilon - \varepsilon \vec{U}_{\text{др}}) \right) - \frac{1}{\rho} \operatorname{div} \vec{J}_{\text{тепл}} + Q_{\text{дис}}. \quad (22)$$

Смысл отдельных членов в правой части:

$-p \operatorname{div} (\vec{V} - \vec{U}_{\text{др}})$  – работа сил давления. В нее включается изменение плотности за счет сжатия или разряжения вещества за вычетом изменения  $\rho$  за счет перемешивания;

$-\operatorname{div} \left( \rho(\vec{V}_\varepsilon - \varepsilon \vec{U}_{\text{др}}) \right)$  – перенос энергии каждой компоненты за вычетом потока вследствие переноса  $\varepsilon$  вместе с потоком массы. Выражение аналогичное диффузии концентраций.  $\vec{V}_\varepsilon = \sum \vec{j}_i \cdot \varepsilon_i$ ,  $\varepsilon = \sum c_i \cdot \varepsilon_i$ , где  $\varepsilon_i$  – внутренняя энергия  $i$ -й компоненты. Вывод этого выражения следующий:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \rho \left[ \sum_i c_i \varepsilon_i \right] + \operatorname{div} \sum_i \rho (c_i (\vec{V} - \vec{U}) + \vec{j}_i) \varepsilon_i = \rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} (\varepsilon \rho \vec{V}) + \\ + \operatorname{div} \sum_i \rho (\varepsilon_i \vec{j}_i - \vec{U} \varepsilon) = \rho \left( \frac{\partial}{\partial t} + \vec{V} \nabla \right) \varepsilon + \operatorname{div} \rho (\vec{V} \varepsilon - \vec{U} \varepsilon). \end{aligned} \quad (23)$$

Вихревая энергия дрейфа передается каскадно мелкомасштабным вихрям и там диссипируется вследствие вязкости во внутреннюю энергию вещества. Интенсивность диссипации в квазистационарном приближении равна

$$Q_{\text{дис}} = \left| \frac{dE_{\text{др}}}{dt} \right| = \left| V \nabla E_{\text{др}} \right| = \left| \frac{1}{\rho} \frac{\partial U_i}{\partial x_k} \Pi_{ik} \right|,$$

$\vec{J}_{\text{тепл}}$  – тепловой поток.

В рамках подсеточной модели легко получить оценки времени выравнивания температуры и концентраций внутри смешанных ячеек. Естественно предположить, что внутри ячейки устанавливается асимптотический спектр вихрей и верен закон подобия Колмогорова – Обухова. Используя его, а также автомодельность дробления частиц  $\frac{dR}{dt} = -R\omega$ , можно получить

$$\tau_{\text{темпер}} = \frac{1}{\omega} \frac{3}{2} \left( 1 - \left( \frac{\chi}{\omega \cdot R_0^2} \right)^2 \right) \approx \frac{3}{2} \frac{1}{\omega} - \text{время вы-}$$

равнивания температуры компонентов;

$$\tau_{\text{гомог}} = \frac{3}{2\omega} \left( 1 + 2/3 \frac{\chi}{D} \left( \frac{\chi}{\omega R_0^2} \right)^{0,5} \right) - \text{время вырав-}$$

нивания температуры и концентраций.

Здесь  $\chi$  – коэффициент температуропроводности;  $D$  – коэффициент молекулярной диффузии;  $R_0$  – размер счетной ячейки.

## 6. Результаты расчетов

Полученная система уравнений была внедрена в счетный газодинамический комплекс "Медуза" [1]. При этом внутри "смешанных" ячеек, содержащих два вещества, составляются уравнения перемешивания ("подсеточная" модель) по схеме

$$\begin{aligned} \frac{dM_1}{dt} = -\frac{M_1}{\tau}; \quad \frac{dM_2}{dt} = -\frac{M_2}{\tau}; \\ \frac{dM_{1+2}}{dt} = \frac{M_1 + M_2}{\tau} \frac{1}{\tau} = \frac{V_{\text{др}} S}{V}, \end{aligned}$$

где  $V$  – объем ячейки;  $M_1$  – масса чистого вещества "1" в ячейке;  $M_2$  – масса чистого вещества "2" в ячейке;  $M_{1+2}$  – масса вещества "смесь";  $S$  – эффективное сечение ячейки в направлении, перпендикулярном скорости дрейфа  $V_{\text{др}}$ ;  $V_{\text{др}} = \frac{\operatorname{rot} A}{\omega^2} \times V$ .

Ниже приведены результаты тестовых расчетов опыта Е. Е. Мешкова с сотрудниками [2]. Эксперименты проводились на ударной трубе. Схема постановки опытов представлена на рис. 1. Область 1 – канал ударной трубы – заполнена воздухом ( $\rho = 1,205 \cdot 10^{-3}$  г/см<sup>3</sup>,  $\gamma = 1,4$ ), область 2 заполнена газом фреон-12 ( $\rho = 5,13 \cdot 10^{-3}$  г/см<sup>3</sup>,  $\gamma = 1,139$ ). Начальное давление в области 1 и 2 равно 1 атм. На правой границе области задано постоянное давление 2,26 атм. Размеры области 1 равны  $49 \times 12$  см, области 2 –  $9 \times 6$  см. В области 2 задана равномерная сетка  $288 \times 192$ , в области 1 над фреоном – равномерная сетка  $200 \times 96$ , в остальной части области 1 – сетка  $240 \times 192$ .

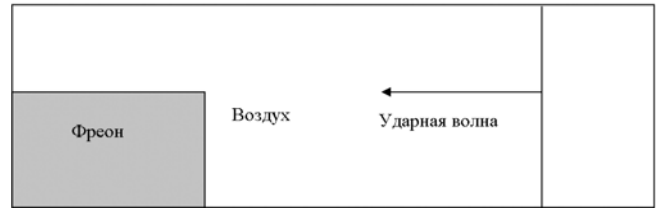


Рис. 1. Схема постановки эксперимента

В опыте исследуется обтекание "тяжелого" угла – течение двух разноплотных газов с перемешиванием. Экспериментальные и расчетные результаты (распределение плотности) приведены на рис. 2.

Как видно, контуры перемешанных областей в опыте и в расчетах с учетом перемешивания близки.

## Заключение

Так как модель феноменологическая, она будет развиваться и уточняться в процессе тестирования по результатам опытов.

## Список литературы

1. Волков С. Г., Жогов Б. М., Софронов И. Д. Современное состояние методики "Медуза" // ВАНТ. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 4. С. 57–63.
2. Жогов Б. М., Клопов Б. А., Мешков Е. Е., Пастернак В. М., Толшмяков А. И. Численный расчет и сравнение с экспериментом задачи о прохождении плоской ударной волны через "тяжелый" угол // Там же. 1992. Вып. 3. С. 59–65.

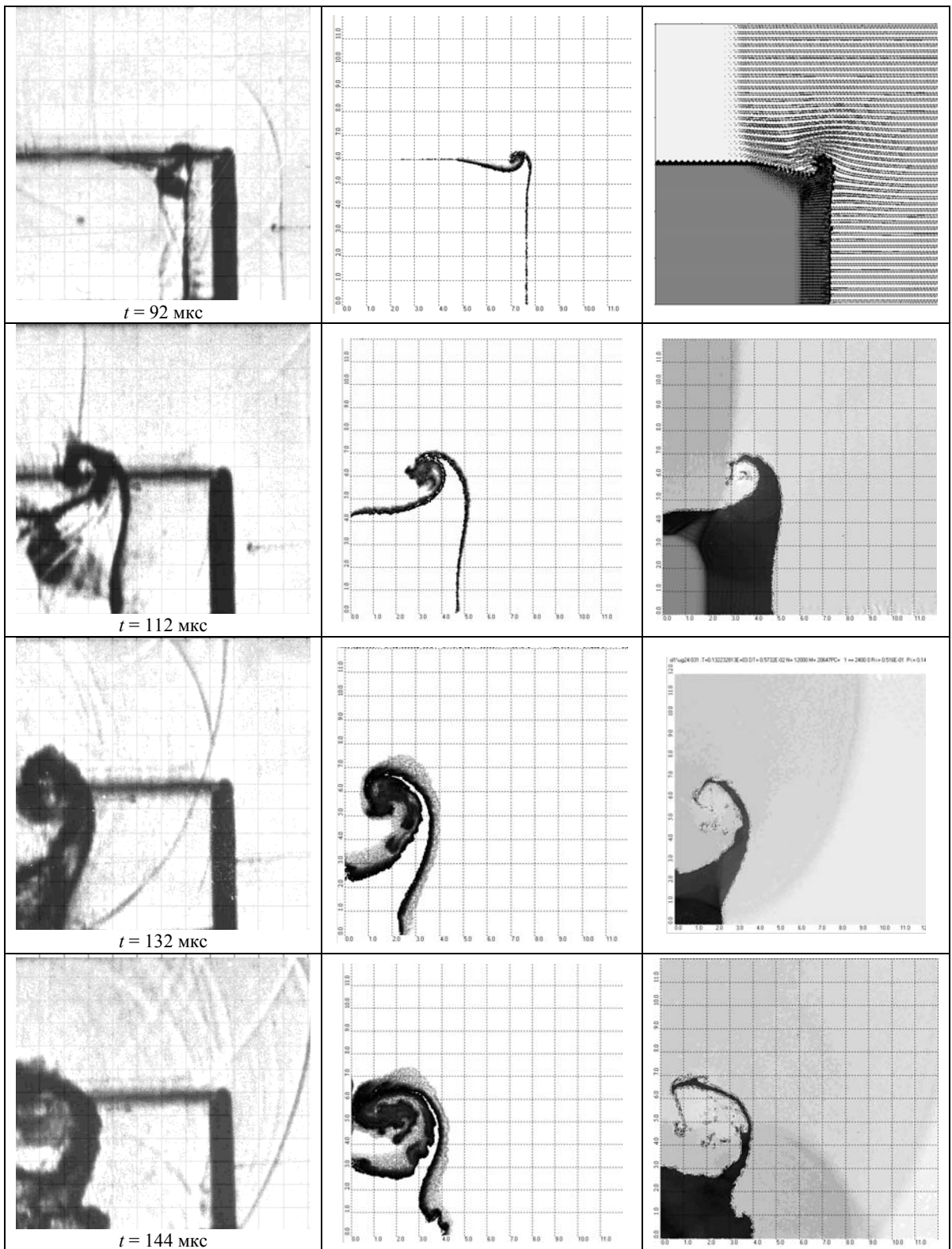


Рис. 2. Слева экспериментальные данные, в центре результаты расчета по "Медузе" с моделью турбулентности (поле концентраций фреона в смеси), справа поле плотности в расчете без турбулентности

Статья поступила в редакцию 03.09.2008.

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ФОРМИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ В СИСТЕМАХ С ДВУХФАЗНОЙ ДИСПЕРСНОЙ СРЕДОЙ. РАСЧЕТЫ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА "МОНТАНА"

А. М. Петров

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Ранее были разработаны численные и теоретические модели кинетики формирования капель и ледяных частиц в смешанных облаках. Наряду с кинетическими уравнениями модель использует уравнения массового и теплового баланса, принимает во внимание разницу в скоростях конденсации пара над водой и льдом, использует реальные скорости конденсационного и коагуляционного роста, учитывает процессы спонтанного промерзания капель, описывает динамику фазового перехода.

На основе разработанной численной модели проведены расчеты для процессов формирования осадков в условиях эксперимента, проведенного в штате Монтана.

### Введение

Для многих видов дисперсных систем задача о формировании смешанных частиц, находящихся в двух фазовых состояниях (твердом и жидком), имеет важное практическое значение. Особенно она актуальна для изучения динамики формирования и выпадения атмосферных осадков [1–3]. При отрицательных температурах в облачных системах могут одновременно присутствовать все фазовые состояния воды: твердое (лед, град, снежинки), жидкое (капли) и газообразное (пар). Процессы развития фаз и их взаимных переходов определяются конденсацией (испарением) пара, промерзанием капель и таянием твердых частиц, коагуляцией. При отрицательных температурах (вплоть до  $-40\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) капли воды могут находиться в метастабильном состоянии, причем попадание ледяных частиц или пылинок (иммерсионных ядер) на поверхность или в объем капли резко стимулирует процесс ее замерзания. При этом времена существования частиц, состоящих одновременно из твердой и жидкой фазы, малы по сравнению с характерными временами конденсации и коагуляции [4–7]. Фактически можно считать, что жидкие капли мгновенно промерзают при их столкновениях с твердыми частицами и двухфазная дисперсная среда состоит из смеси жидких капель и твердых частиц, представляя собой двухкомпонентную систему [4–6]. Появление иммерсионных ядер в каплях происходит в результате парных столкновений и коагуляции. При охлаждении ниже  $-(15\div 20)\text{ }^{\circ}\text{C}$  существенный вклад в процесс зарождения ледяных частиц может внести

спонтанное промерзание капель [8, 9]. Кроме того, в реальных облачных процессах значительный рост ледяных частиц может происходить за счет так называемого механизма Вегенера – Бержерона – Финдайзена [1], который обеспечивает передачу пара от водяных капель к ледяным частицам за счет разности давлений насыщенного пара для этих фаз. Этот механизм носит также название "перегонка" в терминах работ [1, 10].

В работах [4–6] нами разработаны теоретические и численные модели кинетики формирования капель и ледяных частиц в смешанных облаках, учитывающие описанную выше совокупность процессов. Для совместного численного моделирования процессов конденсации и коагуляции использован метод расщепления по физическим процессам. Метод расщепления откалиброван на полученных в работах [4, 5] аналитических решениях кинетических уравнений. Модель кинетики конденсации построена на основе уравнений роста отдельных облачных частиц, уравнений массового и теплового баланса. Для кинетики коагуляции использована модель, разработанная в работах [11, 12]. В этих моделях используются реальные скорости конденсационного и коагуляционного роста водяных капель и ледяных частиц, описание "перегонки" обеспечивается учетом разности давлений насыщенного пара для этих фаз. В уравнениях учитываются процессы спонтанного промерзания капель [8].

В данной работе на основе описанной выше модели выполнено моделирование процессов формирования осадков в условиях эксперимента, проведенного в штате Монтана 19.07.1981 [13, 14].

# Результаты расчетов кинетики формирования осадков для эксперимента "Монтана"

## Экспериментальные данные

Эксперимент был проведен 19.07.1981 в штате Монтана, США. Измеряемое изолированное кучевое облако, характерное для летнего периода данной местности, имело диаметр 6–8 км и примерно к 16:30 местного времени достигло максимума своего развития, после чего оно дало осадки в основном в виде снега и ледяной крупы. Облако характеризуется значительным перепадом высот, температур и давлений. Скорость подъема воздуха в облаке достигала 10 м/с. В эксперименте участвовали 1 планер, 4 самолета и 3 радара. Результаты измерений приведены в работах [13, 14].

Данные зондировки и однородности эквивалентной потенциальной температуры по измерениям планера указывают на применимость лагранжевых расчетов на стадии подъема облака без учета вовлечения окружающего воздуха. Более того, динамика водности говорит в пользу адиабатического характера подъема лагранжевых объемов (термик). Анализ данных по скоростям подъема воздуха внутри облака показал определенную согласованность разных измерений и позволил построить картину распределения ветра по времени и высоте. На основе этих данных нами были построены 10 гипотетических линий подъема термик в облаке. Наиболее информативными являются термики, которые условно обозначены нами М4 и М9, и для которых проведены расчеты кинетики формирования осадков.

**Термик М4** будем считать «стартовавшим» с высоты основания облака 3900 м в момент времени в 16:20:00. В 16:27:00 он достиг высоты 6900 м. Практически весь путь его сопровождал планер. Исходные данные для лагранжевых расчетов могут быть заданы двояким образом: расчетный способ позволяет по начальным данным в основании облака через решение системы дифференциальных уравнений для равновесного адиабатического (с учетом тепловыделения фазовых переходов) подъема найти зависимость давления (или плотности воздуха) от высоты и времени; эмпирический способ основан на типичной зондировке и позволяет найти зависимость давления в термике, полагая его равным внешнему. В обоих вариантах существует возможность дополнительного контроля температуры, получаемой в расчетах. Расчеты по равновесной методике проводились как для варианта выделения теплоты конденсации, так и для полной сублимации. В рассматриваемом диапазоне температур от 0 до  $-20^{\circ}\text{C}$  существенны оба процесса. Нами получено, что измерения планера лежат в вилке возможных значений.

**Термик М9** "стартовал" с высоты 3900 м в момент времени в 16:33:30. В 16:35:30 на высоте 4500 м его пересек самолет Aerocommander. Далее на высотах 5300, 5600, 6000 и 6100 м он последовательно пересекся самолетом Air King в моменты времени соответственно: 16:40; 16:42; 16:48 и 16:50. На высоте 4500 м

его пересек самолет Aerocommander. Далее на высотах 5300, 5600, 6000 и 6100 м он последовательно пересекся самолетом Air King.

Отдельным вопросом является задание исходного спектра аэрозолей в основании облака. Один подход заключается в задании континентального спектра аэрозолей в качестве начального, но неясно, с какой общей концентрацией. В работах [13, 14] таких данных нет. Другой подход состоит в задании известного спектра облачных капель (ОК) на высоте 4300 м в соответствии с измерениями Aerocommander. По крайней мере, этот вариант может быть применен для термика М9, который проходил вблизи. Третий вариант заключается в задании известных спектров ОК и ледяных частиц (ЛЧ) по измерениям Aerocommander на высоте 4500 м. Два последних подхода обладают своим недостатком. Дело в том, что для проходов Aerocommander на высотах 4,3 и 4,5 км имеется по 4 варианта экспериментальных спектров ОК, которые отличаются друг от друга. Можно принять, что для приближенных лагранжевых расчетов целесообразно использовать усредненный спектр ОК. Однако суммирование концентрации ОК показало, что имеется существенное (до нескольких раз!) отличие между: измеренной интегральной, просуммированной по спектрам ОК и измеренными планером концентрациями ОК. Кроме того, суммирование водности по спектрам дает различие с измерением интегральной водности.

В табл. 1, 2 приведены спектры ОК и ЛЧ. Для сведения там же приведены рассчитанные величины водности, концентрации и усредненные спектры, при этом первый символ А означает самолет, второй – номер прохода, третий – порядковый номер измерения в данном проходе, символ G обозначает спектр ледяной крупы «graupel». 1-й проход соответствует высоте 4,3 км, 2-й – 4,5 км, 3-й – 4,6 км.

По нашему мнению, нормированные на 100 % спектры ОК и ЛЧ более точны, чем их абсолютные величины. При задании расчетов для получения правильных результатов необходимо согласовать исходные данные. Например, при выбранной форме спектра, варьируемым параметром является концентрация ОК, которую необходимо подстраивать под значение водности. В этом случае значение концентрации ОК на высоте 4300 м составляет  $\sim 10^3 \text{ см}^{-3}$ , что согласуется с измерениями с помощью планера.

## Постановка и результаты расчетов

Измерения показывают, что на высоте 4,5 км при температуре  $-2,3^{\circ}\text{C}$  наблюдаются частицы ледяной фазы. При этих температурах спонтанное промерзание капель для рекомендованных в работе [8] значений параметров модели незначительно. Значимые количества ЛЧ появились бы только на высотах более 7 км. Повидимому, на высотах  $\sim 4,5$  км в ходе эксперимента наблюдались ледяные кристаллы, образовавшиеся на больших высотах в более ранние моменты времени и выпавшие затем из верхних слоев.

Измерения спектров ЛЧ на самолете Aerocommander (концентрация [см<sup>-3</sup>] в интервале значений диаметра  $D$  [мкм])

Проход 2	< 100	100–300	300–1000	> 1000	Проход 3	< 100	100–300	300–1000	> 1000
AG2-1	1	1	2	1	AG3-1	0,5	2	2	1
AG2-2	1	2	2	1	AG3-2	0	1	2	2
AG2-3	2	15	11	3	AG3-3	1	7	4	3
AG2-4	1	7	3	1	AG3-4	0	4	4	5
AG2-5	0	1	2	1	AG3-5	1	2	2	1
AG2-6	1	4	1	0	AG3-6	0	0	1	0,5
AG2-7	0	1	1	0	AG3-7	–	–	–	–
<AG2> %	9	47	33	11	<AG3> %	5	35	33	27

Таблица 2

Измерения спектров ОК на самолете Aerocommander (концентрация [см<sup>-3</sup>] в интервале значений диаметра  $D$  [мкм])

Интервал	0–3,6	3,6–7,0	7–10,2	10,2–13,3	13,3–16	16–20	20–24,6	Сумма	Водность	< $D$ >
Средний $D$	1,8	5,3	8,6	11,75	14,65	18	22,3			
A1-1	40	60	82	57	9	2	0	250		7,7
A1-2	19	32	46	25	3	1	0	126		7,6
A1-3	40	60	126	70	13	3	0	312	0,14	8,2
A1-4	20	32	60	38	7	1	0	158	0,071	8,3
<A1> %	14,2	22	37	22,35	3,65	0,8	0	300	0,128	8,0
A2-1	0	37	55	53	26	4	2	177		
A2-2	30	41	44	38	13	2	0	168		
A2-3	23	33	50	73	27	4	1	211		9,5
A2-4	1	2	1	0	0	0	0	4		
A2-5	24	41	54	37	9	0	0	165		
A2-6	7	11	11	10	4	0	0	43		
<A2> %	10,84	21,44	28,43	27,39	10,16	1,34	0,40	180	0,106	8,8

**Термик М9.** Отметим, что экспериментальные данные для термика М9 приведены в табл. 2 до радиусов капель менее 20 мкм только потому, что концентрации более крупных капель слишком малы и результаты их измерения статистически не обоснованы. А именно крупные капли замерзают при охлаждении облака в первую очередь. При этом крупные ЛЧ получаются за счет промерзания больших капель, а не за счет перегонки между ОК и ЛЧ. В пользу наличия дополнительного "хвоста" спектра говорит и тот факт, что существует различие между водностью, просуммированной по спектрам капель, и измеренной интегральной водностью. Очевидно, что "недостающая" часть водности приходится на более крупные капли, измерить значения концентраций которых в ходе эксперимента не удалось. Отметим, что наличие крупных капель в реальном спектре весьма вероятно. Например, для получения крупных капель мы продолжали спектр в область больших размеров с использованием следующей функции распределения капель по размерам [15]

$$\Phi(r) = A/(r_0 + r)^k; \quad k \sim 10, \quad r_0 \sim 10 < r >, \quad \text{где } < r > \text{ – средний размер капель в спектре, } A = \text{const.}$$

Спектр продолжался в область больших размеров вплоть до значений радиуса капель  $\sim 300$  мкм.

В табл. 3 приведена зависимость температуры от высоты, полученная в результате расчетов ( $T_{\text{расч}}$ ), а также значения температуры для этих высот, полученные по равновесной методике для конденсации  $T_{\text{конд}}$  и сублимации  $T_{\text{субл}}$  (напомним, что экспериментальные значения температуры лежат между  $T_{\text{конд}}$  и  $T_{\text{субл}}$ ).

Таблица 3

Поведение температуры с изменением высоты

Высота, км	5,3	5,6	6,0	6,1
$T_{\text{субл}}, ^\circ\text{C}$	–6,25	–7,95	–10,31	–10,92
$T_{\text{конд}}, ^\circ\text{C}$	–7,05	–8,91	–11,47	–12,12
$T_{\text{расч}}, ^\circ\text{C}$	–7	–8,7	–11,1	–11,7

Отметим, что расчетные значения температуры, как и экспериментально измеренные на планере, попадают в "вилку" между значениями, полученными по равновесной методике. Таким образом, результаты наших расчетов хорошо согласуются с эксперименталь-

ными данными. В табл. 4 приведены экспериментальные и расчетные значения водности.

Таблица 4

Поведение водности с изменением высоты

Высота, км	5,3	5,6	6,0	6,1
Водность, г/м <sup>3</sup> (расч.)	1,1	1,4	0,8	0,5
Водность, г/м <sup>3</sup> (эсп.)	0,34	0,04	0,06	0,04

Нами было также проведено сравнение результатов с расчетами эксперимента "Монтана" по эмпирическим моделям, разработанным в работе [16]. Сравнение проводилось по водности, ледности и концентрациям ледяных кристаллов (значения, полученные по моделям [16], обозначены "мод").

В табл. 5 приведены экспериментальные и расчетные значения концентраций ледяных кристаллов.

Таблица 5

Поведение концентраций ледяных кристаллов с изменением высоты

Высота, км	5,3	5,6	6,0	6,1
$N_{расч}$ , л <sup>-1</sup>	0	0	0,04	0,05
$N_{эсп}$ , л <sup>-1</sup>	29,3	—	63,8	45,3
$N_{мод}$ , л <sup>-1</sup>	0,013	0,016	0,05	0,084

В наших расчетах ледяные кристаллы получаются в незначительных количествах на больших высотах. При этом размер кристаллов превышает 1 мм. Отметим неплохое совпадение результатов расчетов с результатами расчетов по моделям [16] на больших высотах.

В табл. 6 представлены данные по водности и ледности.

Таблица 6

Поведение водности и ледности с изменением высоты

Высота, км	5,3	5,6	6,0	6,1
Водность, г/м <sup>3</sup>	1,1	1,4	0,8	0,5
Ледность, г/м <sup>3</sup>	0	0	0,8	1,1
Водность-мод, г/м <sup>3</sup>	1,2	1,2	1,1	1,1
Ледность-мод, г/м <sup>3</sup>	1	1,07	1,06	1,05

Отметим неплохое совпадение значений водности и ледности, полученных в ходе расчетов по нашей методике, и результатов расчетов по моделям [16].

**Термик М4.** Начальный экспериментальный спектр капель здесь неизвестен. Для расчетного нахождения спектра нами был использован следующий прием: по методике AERFORM [12] рассчитывался процесс конденсации на спектре Юнге с данными из табл. 5 для термика М4. Полного совпадения добиться не удалось, однако удается согласовать значения счетной концентрации капель. Неплохое совпадение получено для начального спектра, приведенного в табл. 7.

Таблица 7

Начальный спектр ОК для термика М4 на высоте 3,9 км

$\langle r \rangle$ , мкм	0,026	0,08	0,26	0,8	1,3	2,1	4,1	6,5	11,3
$N$ , 1/м <sup>3</sup>	$4 \cdot 10^8$	$3,4 \cdot 10^8$	$5,6 \cdot 10^7$	$1,7 \cdot 10^6$	$4,2 \cdot 10^3$	$1,4 \cdot 10^3$	$10^3$	300	100

В табл. 8 приведены значения температуры с изменением высоты, полученные в результате расчетов, и значения температуры для этих высот, полученные по равновесной методике для конденсации  $T_{конд}$  и сублимации  $T_{субл}$ .

Таблица 8

Поведение температуры с изменением высоты

Высота, км	4,5	5,3	6,1	6,9
$T_{расч}$ , °С	-2,3	-7	-11,9	-17,2
$T_{конд}$ , °С	-2,34	-7,05	-12,12	-17,6
$T_{субл}$ , °С	-1,98	-6,25	-10,92	-16,1

В табл. 9 приведено поведение расчетной и экспериментально измеренной концентраций водяных капель с изменением высоты.

Таблица 9

Поведение с изменением высоты концентрации водяных капель

Высота, км	4,5	5,3	6,1	6,9
$N_{расч}$ , см <sup>-3</sup>	740	648	558	464
$N_{эсп}$ , см <sup>-3</sup>	750	650	600	580

В табл. 10 приведены расчетные и экспериментальные значения водности.

Таблица 10

Поведение водности с изменением высоты

Высота, км	4,5	5,3	6,1	6,9
Водность, г/м <sup>3</sup>	0,73	1,8	2	2,4
Водность, г/м <sup>3</sup> (эсп.)	0,8	1,5	2	2,4

## Расчеты с заданием ЛОЯК

Появление ЛЧ может быть обусловлено сублимацией пара на ЛОЯК (принятое сокращение в зарубежной литературе – ICN). При этом формирование ЛЧ будет происходить за счет конденсационного роста ЛЧ на ядрах ЛОЯК и коагуляции ОК с ЛЧ. Важную роль играет также процесс "перегонки" между ОК и ЛЧ. В этой постановке основной является задача определения концентрации ЛОЯК на высотах 4,3–4,5 км при температуре  $T \approx -2$  °С. Отметим, что в данных условиях в атмосфере присутствует достаточно большое число необходимых частиц Айткена (до  $10^8$ – $10^9$  м<sup>-3</sup>), однако далеко не все они являются сублимирующими ядрами (активируются). Ряд зависимостей, дающих значения концентраций ЛОЯК в зависимости от температуры и пересыщения, приведен в работе [3]. Однако рассчитанные по этим формулам концентрации ЛОЯК при указанных температурах и имеющихся в облаке пересыщениях незначительны и не превышают  $10^3$  м<sup>-3</sup>, в то время как по нашим расчетам хорошее совпадение с экспериментальными данными получено для гораздо больших (на несколько порядков) начальных концентраций ЛОЯК. В той же работе [3] указывается на ряд аномалий в поведении концентраций ЛОЯК – так называемые IN-storms, которые характеризуются внезапным увеличением концентраций ЛОЯК в течение дня (или меньшего периода) на несколько порядков по сравнению с типичными значениями.

В ряде работ [17, 18] показано, что небольшие частицы пылицы и микроорганизмы могут действовать как контактные ядра промерзания при относительно небольшом охлаждении – до  $-4$  °С. Наконец, в работе [19] показано, что приведенные в [3] зависимости противоречат экспериментальным данным и не могут быть рекомендованными для оценки количества ЛОЯК. Таким образом, видно, что для процесса активации ЛОЯК еще нет единого выработанного подхода. В целом этот процесс еще недостаточно изучен и должен являться объектом отдельного исследования. Мы сочли возможным варьировать начальную концентрацию ЛОЯК, несколько завысив ее по сравнению с данными работы [3]. Хорошее совпадение с экспериментальными данными получается, если брать в качестве ЛОЯК частицы Айткена (см., например, [20]) с концентрацией  $N_0 = 10^6$  м<sup>-3</sup>. Такое количество ЛОЯК могло появиться, например, как результат IN-storms; не исключено также, что повышенная их концентрация связана с таким химическим составом ядер в эксперименте, который стимулирует сублимацию пара на ядрах.

В табл. 11, 12 показаны результаты расчетов для термиком М4, М9 с заданием ЛОЯК и их сравнение с имеющимися экспериментальными данными. Там же приведены результаты расчетов по модели [16], которые обозначены "мод".

Таблица 11

Сравнение экспериментальных и расчетных данных для термика М9

Высота, км	5,3	5,6	6,0	6,1
$N_{\text{ЛЧ расч.}} \text{ л}^{-1}$	440	520	174	68
$N_{\text{ЛЧ эксп.}} \text{ л}^{-1}$	29,3	–	63,8	45,3
$N_{\text{ОК расч.}} \text{ см}^{-3}$	648	574	284	207
$N_{\text{ОК мод.}} \text{ см}^{-3}$	680	430	116	112
Ледность, г/м <sup>3</sup> (расч.)	0,03	0,01	0,9	1,2
Ледность, г/м <sup>3</sup> (мод.)	1	1,07	1,06	1,05
Водность, г/м <sup>3</sup> (расч.)	1,3	1,4	0,9	0,7
Водность, г/м <sup>3</sup> (мод.)	1,2	1,2	1,1	1,1
Водность, г/м <sup>3</sup> (эсп.)	0,34	0,04	0,06	0,04

Таблица 12

Сравнение экспериментальных и расчетных данных для термика М4

Высота, км	4,5	5,3	6,1	6,9
Ледность, г/м <sup>3</sup> (расч.)	0,0046	0,01	0,034	0,087
Ледность, г/м <sup>3</sup> (мод.)	0,006	0,08	0,37	0,8
$N_{\text{ЛЧ расч.}} \text{ л}^{-1}$	135	330	390	428
$N_{\text{ЛЧ мод.}} \text{ л}^{-1}$	0,3	3,5	61	200
Водность, г/м <sup>3</sup> (расч.)	0,73	1,8	2	2,4
Водность, г/м <sup>3</sup> (мод.)	0,88	1,27	1,55	1,48
$N_{\text{ОК расч.}} \text{ см}^{-3}$	740	650	560	460
$N_{\text{ОК мод.}} \text{ см}^{-3}$	422	237	220	199



Поведение с изменением высоты расчетных и экспериментальных водности, а также ледности и средних радиусов ОК и ЛЧ для термика М9 представлено на рис. 1 и 2. Как видно из рис. 1, начиная с высоты

~5,6 км, происходит уменьшение водности и быстрый рост ледности. Это обусловлено тем, что, начиная с высоты ~5,5 км, скорость подъема термика в атмосфере уменьшилась почти в 3 раза, поэтому увеличивается время его подъема. В такой ситуации усиливается влияние процессов коагуляции и становится более заметным «промерзание» ОК за счет их коагуляции с ЛЧ. Кроме того, наши расчеты показали, что на высотах ~5,8 км. очень активно идет процесс «перегонки». Медленный рост среднего размера ОК (см. рис. 2) при этом в основном обусловлен конденсационным ростом крупных ОК и их коагуляцией между собой.

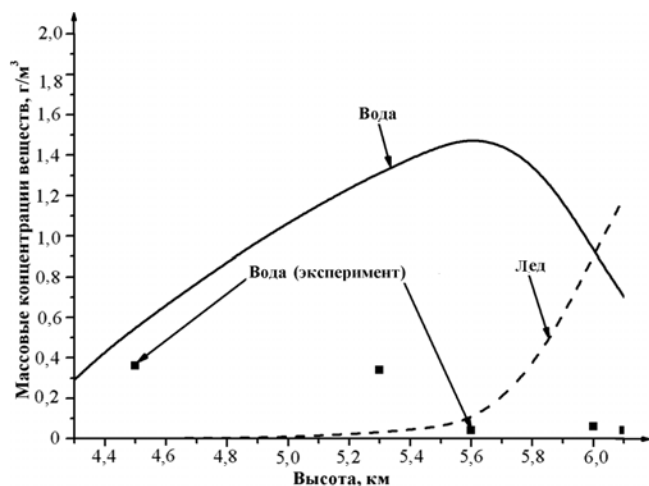


Рис. 1. Поведение водности и ледности с изменением высоты в термике М9

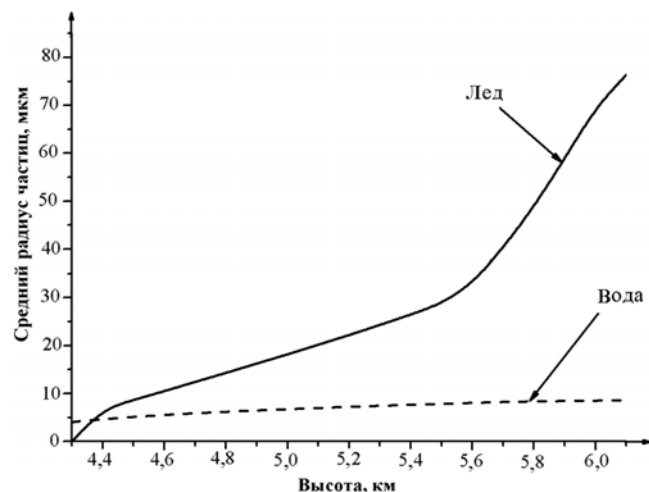


Рис. 2. Поведение средних радиусов ОК и ЛЧ с изменением высоты в термике М9

Поведение с изменением высоты расчетных и экспериментальных водности, а также ледности и средних радиусов ОК и ЛЧ для термика М4 представлено на рис. 3 и 4. Видно, что такого резкого уменьшения вод-

ности и быстрого роста ледности, как для термика М9, не происходит. Дело в том, что скорость подъема термика М4 с изменением высоты увеличивается и «промерзания» ОК за счет их коагуляции с ЛЧ практически не происходит из-за малого времени коагуляции.

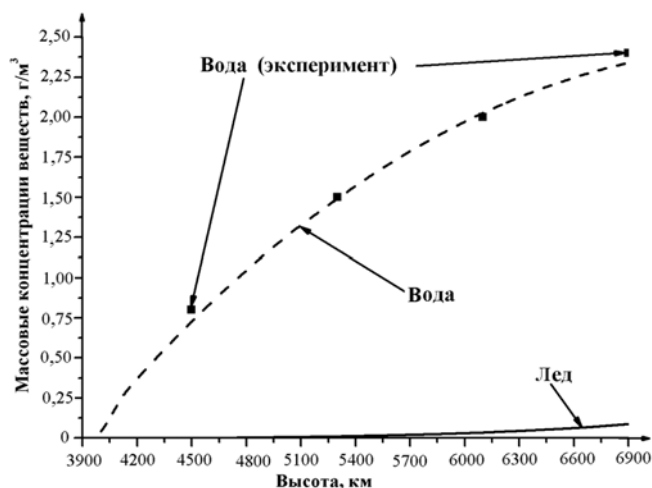


Рис. 3. Поведение водности и ледности с изменением высоты в термике М4

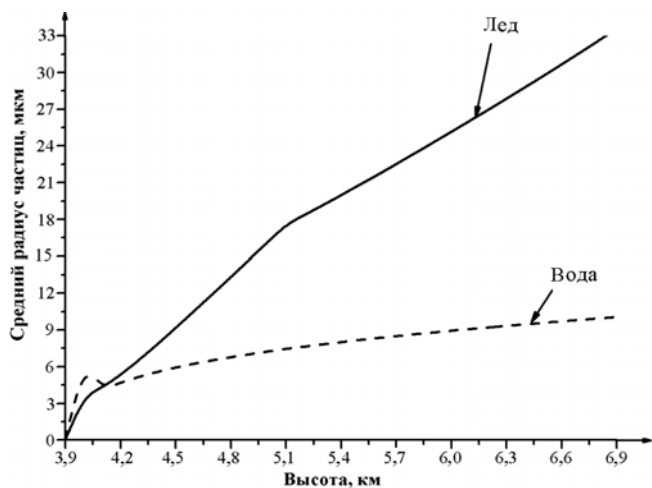


Рис. 4. Поведение средних радиусов ОК и ЛЧ с изменением высоты в термике М4

На рис. 5, 6 приведены расчетные и экспериментальные спектры для обоих термиков на высоте 4,5 км.

Отметим, что все результаты расчетов неплохо совпадают как с экспериментальными результатами, так и с расчетами по моделям [16], воспроизводя не только общую картину процессов, но и обнаруживая количественное согласие. Наилучшее совпадение получено для термика М4. По-видимому, это связано с тем, что в этом случае экспериментальные данные хорошо подходят для сравнения с лагранжевыми расчетами, поскольку измерения проводились на планере, который фактически сопровождал термик М4 вдоль всей траектории. Следует также отметить, что использование единых констант для расчетов по термикам М4 и М9 позволяет получить результаты, со-

гласующиеся как с экспериментальными данными, так и с расчетами по другим моделям.

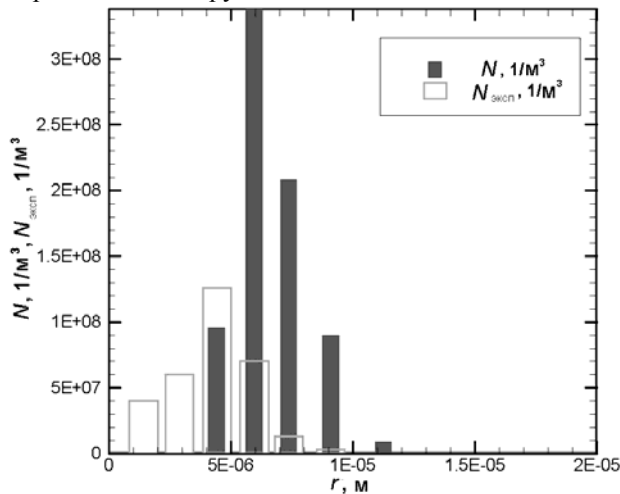


Рис. 5. Сравнение расчетных и экспериментальных спектров ОК для термика М4 на высоте 4,5 км

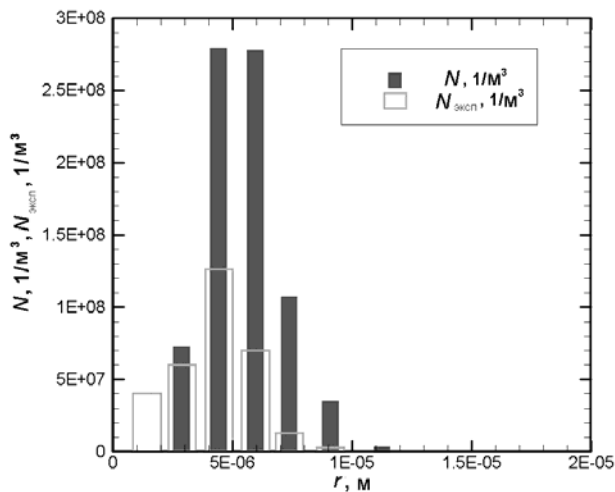


Рис. 6. Сравнение расчетных и экспериментальных спектров ОК для термика М9 на высоте 4,5 км

## Заключение

Для иллюстрации работоспособности, разработанной в работах [4–6] численной модели, выполнено моделирование процессов формирования осадков в эксперименте, проведенном в штате Монтана 19.07.1981. Проанализированы экспериментальные данные [13, 14], на основе чего выполнена постановка расчетов для формирования частиц в поднимающихся лагранжевых термиках, составляющих облачную систему. Расчеты проведены двумя способами: путем задания определенных концентраций ЛОЯК в облаке, а также путем использования модели спонтанного промерзания капель [8]. Полученные результаты не только воспроизводят общую картину процессов, но и, в ряде случаев, обнаруживают полное количественное совпадение как с экспериментальными данными, так и с результатами расчетов по другим моделям.

Материал этой статьи является частью будущей кандидатской диссертации автора. Автор благодарит своего научного руководителя д-ра физ.-мат наук, профессора В. Н. Пискунова за постановку задач, постоянную поддержку и помощь в работе. Автор благодарит также д-ра физ.-мат. наук А. И. Голубева за создание математической программы, в которой реализована построенная численная модель, и за постоянный интерес к этой работе. Автор выражает благодарность К. Г. Гайнуллину за помощь при постановке расчетов для эксперимента "Монтана" и сотрудника СПБАЭП М. А. Затевахины за предоставление результатов расчетов по моделям работы [16] для сравнения.

## Список литературы

1. Мейсон Б. Дж. Физика облаков. Л.: Гидрометеоиздат, 1961.
2. Rogers R. R. A short course in cloud physics. Oxford: Pergamon Press, 1978.
3. Pruppacher H. R. and Klett J. D. Microphysics of cloud and precipitation. Dordrecht: Kluwer Academic Press, 1997.
4. Петров А. М. Теоретические и численные модели кинетики формирования частиц в системах с двухфазной дисперсной средой // ВАНТ. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 2–3. С. 41–48.
5. Piskunov V. N., Petrov A. M. Condensation / coagulation kinetics for mixture of liquid and solid particles: analytical solutions // J. Aerosol Sci. 2002. Vol 33. P. 647–657.
6. Piskunov V. N., Petrov A. M., Golubev A. I. Modeling particle formation kinetics in mixed-phase clouds // J. Aerosol Sci. 2003. Vol. 34. P. 1555–1580.
7. Качурин Л. Г., Морачевский В. Г. Кинетика фазовых переходов воды в атмосфере. Л.: ЛГУ, 1965.
8. Shiino J. A numerical study of precipitation development in cumulus clouds // Papers in Meteorology and Geophysics. 1978. Vol. 29, N 4. P. 157–194.
9. Cotton T. L. Numerical simulation of precipitation development in supercooled cumuli. Part II // Mon. Wea. Rev. 1972. Vol. 100, P. 764–784.
10. Bell K., Ford I. J. Criteria for broadening size distribution due to cooling and freezing of a water aerosol // J. Aerosol Sci. 2000. Vol. 31. Suppl. 1. P. 799–S800.
11. Piskunov V. N. Coagulation kinetics of composite particles // J. Aerosol Sci. 1997. Vol. 28, N 1. P. 647–648.
12. Golubev A. I., Piskunov V. N., Ismailova N. A. "AERFORM" code for numerical simulation of aerosol formation kinetics // J. Aerosol Sci. 1999. Vol. 30, N 1, P. 231.
13. Dye J. E., Jones J. J., Winn W. P., Cerni T. A., Gardiner B., Lamb D., Pitter R.L., Hallet, J., Saunders, C.P.R. Early Electrification and Precipitation Development in a Small, Isolated Montana Cumulonimbus // J. of Geophys. Res. 1986. Vol. 91, N D1. P. 1231–1237.

14. Gardiner B., Lamb D., Pitter R. L. and Hallet J. Measurements of Initial Potential Gradient and Particle Charges in a Montana Summer Thunderstorm // *J. Geophys. Res.* 1985. Vol. 90, N D4. P. 6079–6086.
15. Волощук В. М., Седунов Ю. С. Процессы коагуляции в дисперсных системах. Л.: Гидрометеиздат, 1975.
16. Кароль И. Л., Затевахин М. А., Ожигина Н. А. и др. Численная модель динамических, микрофизических и фотохимических процессов в конвективном облаке // *Изв. РАН, ФАО.* 2000. Т. 36, № 6. С. 1–16.
17. Vali G., Christensen M., Fresh R. W., Galyan E. L., Maki L. R., Schnell R. C. Biogenic ice nuclei. Part 2: Bacterial sources // *J. of Atm. Sci.* 1976. P. 1565–1570.
18. Levin, Z., Yankofsky S. A. Contact versus immersion freezing of freely suspended droplets by bacterial ice nuclei // *J. Clim. Appl. Met.* 1983. Vol. 22. P. 1964–1966.
19. Gorbunov B., Baklanov A., Kakutkina N., Windsor H. L., Toumi R. Ice nucleation on soot particles // *J. Aerosol Sci.* 2001. Vol. 32. Suppl 2. P. 199–215.
20. Пискунов В. Н. Теоретические модели кинетики формирования аэрозолей. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2000.

Статья поступила в редакцию 24.09.2008.

## НЕСТАЦИОНАРНАЯ ЗАДАЧА МИЛНА С ПОСТОЯННЫМ ОБЪЕМНЫМ ИСТОЧНИКОМ НЕЙТРОНОВ В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ИНЕРТНОЙ СРЕДЕ

Н. Б. Бабичев, И. В. Лутиков, А. А. Севастьянов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Решен не рассматривавшийся ранее вариант задачи Милна с линейным по времени возрастанием равновесной нейтронной плотности.

### Введение

Задача Милна о распределении нейтронов внутри полубесконечной однородной среды решалась разными авторами в разное время. В работах [1, 2] представлены известные решения нескольких вариантов стационарной задачи Милна с не зависящей от времени плотностью нейтронов внутри однородной среды, характеризующейся произвольной активностью  $h$

$$h = \frac{v\alpha_f + \alpha_s}{\alpha}, \quad (1)$$

где  $\alpha = \alpha_s + \alpha_f + \alpha_c$  – обратный пробег нейтрона;  $\alpha_s$ ,  $\alpha_f$ ,  $\alpha_c$  – соответственно макроскопические сечения рассеяния, деления и поглощения;  $v$  – среднее число нейтронов, возникающих в одном акте деления ядра.

В случаях инертной, размножающей и поглощающей нейтроны сред  $h = 1$ ,  $h > 1$  и  $h < 1$  соответственно.

В работе [3] решена квазистационарная задача Милна. Квазистационарным называется экспоненциальный закон изменения со временем функции распределения нейтронов  $\Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega})$  и их плотности  $n(t, \vec{r}) = \int d\vec{\Omega} \Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega})$

$$\Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega}) = e^{\lambda t} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}), \quad n(t, \vec{r}) = e^{\lambda t} n(\vec{r}). \quad (2)$$

Здесь

$$\lambda = (h - 1)\alpha V; \quad (3)$$

$t$  – время;  $\vec{r}$  – радиус-вектор точки наблюдения;  $\vec{\Omega} = \frac{\vec{V}}{V}$  – единичный вектор, направленный вдоль вектора  $\vec{V}$  скорости полета нейтрона.

Из выражений (2), (3) видно, что стационарное решение в инертной среде ( $h = 1$ ) представляет собой

частный случай квазистационарного решения задачи Милна.

В работе [3] показано, что в размножающей среде ( $h > 1$ ) единственно правильным является квазистационарное решение задачи Милна\*, которое реализуется вне зависимости от наличия или отсутствия в среде внешнего источника нейтронов.

Задача Милна для поглощающей среды ( $h < 1$ ) имеет как стационарные (см. [1, 2]), так и квазистационарные физические решения (см. [3]). При этом квазистационарное решение получается из однородного кинетического уравнения. В работе [1] представлено несколько стационарных решений неоднородного кинетического уравнения в поглощающей среде ( $h < 1$ ) с различными не зависящими от времени источниками нейтронов.

Решенный ниже (см. раздел 1) вариант задачи Милна в инертной среде ( $h = 1$ ) с постоянным объемным источником до сих пор еще не рассматривался.

### 1. Точное теоретическое решение задачи Милна с постоянным объемным источником нейтронов, действующим в инертной среде

Примем те же физические упрощающие предположения, что и в задаче Милна (см. [1, 2]), и рассмотрим пока произвольную по геометрии систему из однородного ( $\alpha = \text{const}$ ) вещества с любым значением  $h$ . Тогда справедливо следующее односкоростное уравнение переноса нейтронов внутри среды

---

\* Соответствующее формальное стационарное математическое решение при  $h > 1$  (см. [1, 2]) существует, но оно противоречит физическому смыслу, так как приводит к возникновению в среде областей с отрицательной плотностью нейтронов.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega})}{\partial t} + V(\vec{\Omega} \nabla) \Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega}) + \alpha V \Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega}) = \\ = \frac{h\alpha V}{4\pi} n(t, \vec{r}) + Q, \end{aligned} \quad (4)$$

$Q$  – постоянный объемный источник нейтронов;

$\nabla = \frac{\partial}{\partial \vec{r}}$  – оператор Гамильтона.

В работе [3] показано, что если оптическую толщину  $\alpha R$  инертной системы ( $h=1$ ) с характерным размером  $R$  устремить к бесконечности, то при  $Q \neq 0$  полное количество нейтронов в системе  $N$  от времени зависит следующим образом:  $N(t) = N_0 + \text{const } t$ ,  $N_0 = N(t=0)$ .

Далее мы будем пользоваться некоторыми результатами работы [3], в которой рассмотрение проводится в  $\vec{z}$ -пространстве, радиус-вектор точки наблюдения в котором равен

$$\vec{z} = h\alpha \vec{r}. \quad (5)$$

В формуле (4) осуществим замены переменных  $\vec{r} \rightarrow \vec{z}$  и  $t \rightarrow \tau$ , где

$$\tau = h\alpha V t. \quad (6)$$

Очевидно, что функция распределения  $\Psi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega})$  в фазовом пространстве векторов  $\vec{z}, \vec{\Omega}$  подчиняется следующему кинетическому уравнению:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \left( \vec{\Omega} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} \right) \right] \Psi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}) + \frac{\Psi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega})}{h} = \frac{n(\tau, \vec{z})}{4\pi} + q, \\ q = \frac{Q}{h\alpha V} = \text{const}. \end{aligned} \quad (7)$$

Положив в выражениях (5), (6), (7)  $h=1$  и перейдя к пределу  $\alpha R \rightarrow \infty$  (это соответствует задаче Милна), решение (7) будем искать в следующем виде:

$$\Psi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}) = (c\tau + b) \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}), \quad (8)$$

$c$  и  $b$  – константы.

После подстановки (8) в (7) при  $h=1$  с учетом того, что

$$\frac{\partial \Psi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega})}{\partial \tau} = c \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}) + (c\tau + b) \frac{\partial \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega})}{\partial \tau}, \quad (9)$$

и деления левой и правой частей полученного как нового кинетического уравнения на сумму  $c\tau + b$  имеем

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\partial}{\partial \tau} + \left( \vec{\Omega} \frac{\partial}{\partial \vec{z}} \right) \right] \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}) + \left( 1 + \frac{c}{c\tau + b} \right) \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}) = \\ = \frac{1}{4\pi} \int d\vec{\omega} \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\omega}) + \frac{q}{c\tau + b}. \end{aligned} \quad (10)$$

В пределе  $\tau \rightarrow \infty$  вместо (10) получаем стационарное кинетическое уравнение

$$\left[ 1 + \left( \vec{\Omega} \frac{d}{d\vec{z}} \right) \right] \varphi_0(\vec{z}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int d\vec{\omega} \varphi_0(\vec{z}, \vec{\omega}), \quad (11)$$

которому удовлетворяет не зависящая от времени предельная равновесная функция распределения нейтронов

$$\varphi_0(\vec{z}, \vec{\Omega}) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \varphi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}). \quad (12)$$

Можно утверждать, что решение нестационарного кинетического уравнения (7) в случае произвольной по геометрии однородной инертной системы при  $\alpha R \rightarrow \infty$  с течением времени сколь угодно близко приближается к функции

$$\Psi(\tau, \vec{z}, \vec{\Omega}) = (c\tau + b) \varphi_0(\vec{z}, \vec{\Omega}). \quad (13)$$

Аналогично этому функция распределения нейтронов  $\Psi(t, \vec{r}, \vec{\Omega})$  (см. уравнение (4)) при достаточно больших  $t$  тоже хорошо описывается произведением линейной по  $t$  и пространственно-угловой частей. Постоянные в формуле (13) определяются мощностью источника и начальным условием задачи, а независящая от времени функция  $\varphi_0(\vec{z}, \vec{\Omega})$  – типом геометрии системы и граничным условием.

Отметим, что геометрия рассмотренных выше произвольных однородных систем ограничена классом односвязных объектов со всюду невогнутыми внешними поверхностями (см. [3]).

Уравнение переноса нейтронов в инертной среде (11) в точности совпадает с тем, на основе которого в работе [3] была доказана предельная теорема подобия стационарных и квазистационарных систем.

Из предельной теоремы подобия (см. [3]) следует, что решение уравнения (11) для плоской полубесконечной геометрии задачи Милна не отличается от полученного Плачком, Зейделем и Марком в [4–6] при  $h=1$  точного решения аналитического стационарного кинетического уравнения

$$\left( 1 + \mu \frac{d}{dz} \right) \Psi(z, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu' \Psi(z, \mu') \quad (14)$$

с граничным условием

$$\Psi(z=0, \mu > 0) = 0, \quad (15)$$

где  $z = \alpha x$ ,  $x$  – декартова координата точки, расположенной внутри однородной инертной среды.

В случае геометрии задачи Милна соотношение (11) переходит в уравнение (14) для функции  $\varphi_0(z, \mu)$ .

В формуле (15)  $\mu = \cos \vartheta$  – косинус угла  $\vartheta$  между направлением полета нейтрона и положительным направлением оси  $OZ$  (при этом предполагается, что вещество находится в области  $z \geq 0$ , а слева ( $z < 0$ ) от плоской границы  $z=0$  полупространство пустое).

Здесь и ниже (см. раздел 2) нейтронную плотность в инертной среде, определенную в работах [4–6], будем обозначать так:

$$n_P(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu' \Psi_P(z, \mu'). \quad (16)$$

Она состоит из асимптотической части  $n_{P0}(z)$  и отрицательной добавки  $\Delta n_P(z) < 0$ , которую надо учитывать только при малых значениях  $z$  ( $z \leq \frac{2}{\alpha}$ ),

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \Delta n_P(z) = 0;$$

$$n_P(z) = n_{P0}(z) + \Delta n_P(z), \quad n_P(0) = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0,5773; \quad (17)$$

$$n_{P0}(z) = z + z_0, \quad z_0 = 0,7104; \quad (18)$$

$$\Delta n_P(z) = -\frac{1}{4\sqrt{3}} \int_0^1 \frac{d\eta \exp\left(-\frac{z}{\eta}\right)}{P(\eta) \left\{ [1 - \eta \operatorname{arth}(\eta)]^2 + \left(\frac{\pi\eta}{2}\right)^2 \right\}}; \quad (19)$$

$$P(\eta) = \frac{1}{2\sqrt{1+\eta}} \exp\left\{ \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{dy y \operatorname{ctg}[\eta \operatorname{tg}(y)]}{1 - y \operatorname{ctg}(y)} \right\}; \quad (20)$$

$$\int_0^1 d\eta P(\eta) = 1. \quad (21)$$

Подведем итоги. Предельное равновесное решение поставленной выше нестационарной задачи Милна с постоянным объемным источником в инертной среде описывается полученными в работах [4–6] функциями. Искомая равновесная нейтронная плотность внутри инертной среды  $n_0(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu \varphi_0(z, \mu)$  равна функции

$n_P(z)$ , определенной формулами (17)–(21). Очевидно, что  $\varphi_0(z, \mu) = \Psi_P(z, \mu)$ .

## 2. Результаты численного расчета

Численно по математической методике [7] решалось кинетическое уравнение

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Psi(t, x, \mu)}{\partial t} + V\mu \frac{\partial \Psi(t, x, \mu)}{\partial x} + \alpha V \Psi(t, x, \mu) = \\ = \frac{\alpha V}{2} \int_{-1}^{+1} d\mu' \Psi(t, x, \mu') + Q, \quad Q = \text{const}. \end{aligned} \quad (21)$$

Полубесконечная инертная среда моделировалась бесконечной в двух измерениях пластиной с инертным веществом  $\left( h = 1, \quad \alpha = 1 \frac{1}{\text{см}} \right)$  в области  $x \in [0, x_{\max} = 100 \text{ м}]^*$ .

\* Оптическая толщина такой системы очень велика:  $\alpha x_{\max} = 10^4$ .

Были приняты граничные условия

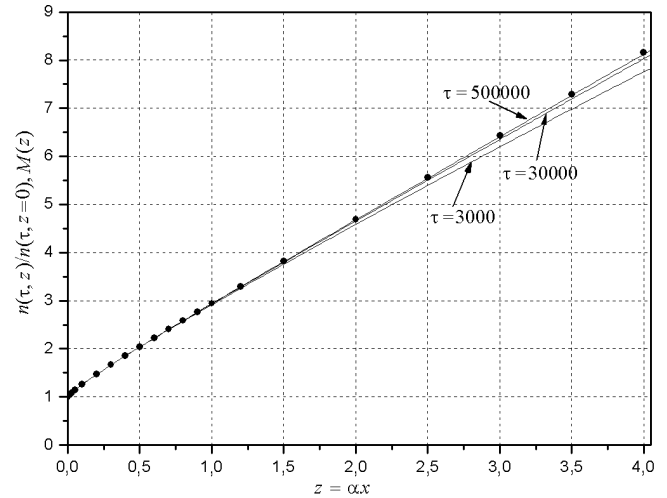
$$\Psi(t, x = 0, \mu > 0) = 0, \quad \Psi(t, x = x_{\max}, \mu < 0) = 0 \quad (22)$$

и начальное условие

$$\Psi(t = 0, 0 \leq x \leq x_{\max}, \mu) = 0. \quad (23)$$

Как и ожидалось (см. раздел 1), при  $\tau \gg 1$  численное решение вышло на линейный по времени асимптотический режим.

Обратимся к следующему рисунку.



Численные результаты для отношения  $\frac{n(\tau, z)}{n(\tau, z=0)}$  (сплошные кривые) и известная (см. [4–6]) функция

$$M(z) = \frac{n_P(z)}{n_P(z=0)} \quad (\text{точки})$$

Из рисунка следует, что по мере увеличения  $\tau$  результат численного расчета приближается к равновесной функции  $M(z) = \frac{n_P(z)}{n_P(z=0)}$  и при значении  $\tau \approx 500000$  практически от нее не отличается. Это является подтверждением правильности полученных в разделе 1 новых теоретических результатов.

Авторы благодарны С. В. Мжачих и Н. В. Колобяниной за проведение ими численного расчета по методике [7].

## Список литературы

1. Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Издво Главного управления по использованию атомной энергии при Совете Министров СССР, 1960.
2. Романов Ю. А. Критические параметры реакторных систем. Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для решения диффузионных задач (усовершенствованный диффузионный метод). М.: Госатомиздат, 1960. С. 3–26.

3. Бабичев Н. Б., Лутиков И. В., Незнамов В. П. Особенности односкоростной кинетики нейтронов в оптически толстых однородных системах и решение квазистационарного варианта задачи Милна // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 2. С. 21–31.

4. Placzek G., Seidel W. // Phys. Rev. 1947. Vol. 72. P. 550.

5. Placzek G. // Phys. Rev. 1947. Vol. 72. P. 556.

6. Mark C. // Phys. Rev. 1947. Vol. 72. P. 558.

7. Разин А. Н., Долголева Г. В., Мжачих С. В., Рожков А. А., Шапоренко Е. В., Юдинцев В. Ф. Развитие методик и программ расчета турбулентных течений с использованием модели В.В.Никифорова // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2007. Вып. 1. С. 121–133.

Статья поступила в редакцию 09.10.2008.

# ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ И ДРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК В ОПТИЧЕСКИ ТОЛСТЫХ ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМАХ

Н. Б. Бабичев, В. Г. Морозов, А. А. Севастьянов

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

В случае однородных оптически толстых водородосодержащих систем с примесями делящихся веществ и поглотителей нейтронов найдены приближенные решения кинетического уравнения. Полученные теоретические результаты удовлетворительно согласуются с экспериментом и могут оказаться полезными для тестирования соответствующих математических методик численного решения спектрального уравнения переноса нейтронов в системах, в которых необходимо учитывать тепловое движение ядер водорода.

## Введение

В данной работе исследуются оптически толстые однородные системы, состоящие из полиэтилена ( $\text{CH}_2$ ) или воды ( $\text{H}_2\text{O}$ ) с примесями делящихся материалов и поглотителей нейтронов. Задача о спектре решается отдельно в области замедления нейтронов и в тепловой области. Затем полученные спектры сшиваются при некотором значении энергии нейтронов  $E_* \gg T$  ( $T$  – температура среды) в надтепловой области. Задача определения спектра в тепловой области решается в рамках так называемой газовой модели (предполагается, что атомы в молекулах воды и полиэтилена свободны). Используются и другие упрощающие физические предположения, о которых говорится по мере изложения теоретических материалов.

## 1. Спектр быстрых и надтепловых нейтронов

Для функции распределения нейтронов  $\tilde{\Psi}(t, \vec{r}, E, \vec{\Omega})$  ( $E$  – энергия нейтрона,  $\vec{\Omega} = \frac{\vec{V}}{V}$ ,  $\vec{V}$  – вектор скорости нейтрона) запишем кинетическое уравнение, справедливое в точке наблюдения с радиус-вектором  $\vec{r}$  в момент времени  $t$

$$\frac{1}{V} \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\Psi}(t, \vec{r}, E, \vec{\Omega}) + (\vec{\Omega} \nabla) \tilde{\Psi} + \alpha_t \tilde{\Psi} = \int dE' d\vec{\Omega}' K(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega}) \tilde{\Psi}(t, \vec{r}, E', \vec{\Omega}') + S, \quad (1)$$

где  $S$  – источник нейтронов спектра деления ( $g = g(E)$ ), равный

$$S(t, \vec{r}, E) = g(E) \int d\vec{\Omega}' \int dE' v(E') \alpha_f(t, \vec{r}, E') \tilde{\Psi}(t, \vec{r}, E', \vec{\Omega}'); \quad (2)$$

$v(E')$  – среднее число вторичных нейтронов, возникающее в одном акте деления ядра нейтроном с энергией  $E'$ .

Далее предполагается, что макроскопические сечения рассеяния, деления, захвата и полное зависят только от энергии нейтрона, т. е.  $\alpha_s = \alpha_s(E)$ ,  $\alpha_f = \alpha_f(E)$ ,  $\alpha_c = \alpha_c(E)$ ,  $\alpha_t = \alpha_s + \alpha_f + \alpha_c = \alpha_t(E)$ .

Приняв квазистационарное приближение ( $\tilde{\Psi}(t, \vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) e^{\lambda t}$ ), для упрощения ядра в интеграле столкновений (1) используем следующие физические предположения. Будем считать, что сброс энергии нейтронов происходит только при рассеянии на водороде, а рассеяние на всех других веществах приводит лишь к изменению направления полета нейтрона.

В этом случае справедлива следующая суперпозиция:

$$K(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega}) = K_H(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega}) + K_0(E', \vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \delta(E' - E); \quad (3)$$

$$K_H(E', \vec{\Omega}', E, \vec{\Omega}) = \frac{\alpha_H(E')}{2\pi E'} \delta\left(\vec{\Omega}' \vec{\Omega} - \sqrt{\frac{E}{E'}}\right). \quad (4)$$

В соотношении (4) (см., например, [1])  $E' \geq E$ , а при  $E' < E$   $K_H = 0$ . Индексы «H» и «0» отмечают соответственно столкновения на водороде и на ядрах всех ос-



гальных веществ. Кинетическое уравнение теперь принимает вид

$$\begin{aligned} \frac{\lambda}{V} \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + (\vec{\Omega} \nabla) \Psi + \alpha_t \Psi = \int_E^\infty \frac{dE'}{E'} \alpha_H(E') \int d\vec{\Omega}' \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + \\ + \int d\vec{\Omega}' K_0(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + g(E) \int_0^\infty dE' v(E') \alpha_f(E') \int d\vec{\Omega}' \Psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}'). \end{aligned} \quad (5)$$

Введем обозначения скалярного и векторного потоков

$$\Psi(\vec{r}, E) = \int d\vec{\Omega} \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}); \quad (6)$$

$$\vec{j}(\vec{r}, E) = \int d\vec{\Omega} \vec{\Omega} \Psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (7)$$

и проинтегрируем (5) по  $\vec{\Omega}$  с учетом того, что  $\int d\vec{\Omega} K_0(\vec{\Omega}', \vec{\Omega}) = \alpha_S(E)$ . После этого усредним кинетическое уравнение по объему системы. Тогда получим

$$H(E) \Psi(E) = \int_E^\infty \frac{dE'}{E'} \alpha_H(E') \Psi(E') + g(E) \int_0^\infty dE' v(E') \alpha_f(E') \Psi(E'); \quad (8)$$

$$H(E) = \alpha_H(E) + \alpha_c(E) + \alpha_f(E) + \frac{\lambda}{V(E)} + W(E); \quad (9)$$

$$W(E) = \frac{\int d\vec{r} \operatorname{div} \vec{j}(\vec{r}, E)}{\int d\vec{r} \Psi(\vec{r}, E)} = \frac{\int d\vec{S} \vec{j}(E)}{\int d\vec{r} \Psi(\vec{r}, E)} \quad (10)$$

– эффективное сечение поглощения нейтронов, связанное с их утечкой (интегралы в числителе и знаменателе берутся соответственно по поверхности и по объему системы);  $V(E) = b_0 \sqrt{E}$  – скорость нейтрона ( $b_0$  – известная константа).

Для бесконечной среды  $\Psi$  от  $\vec{r}$  не зависит. В случае оптически толстой системы принято приближение постоянства спектра нейтронов в пространстве и  $\Psi(E)$  – это усредненный по объему системы спектр.

Используя нормировочное условие

$$\int_0^\infty dE' v(E') \alpha_f(E') \Psi(E') = 1 \quad (11)$$

и помня нормировку спектра делительных нейтронов

$$\int_0^\infty dE' g(E') = 1, \quad (12)$$

из (8) для плотности столкновений

$$q(E) = H(E) \Psi(E) \quad (13)$$

получим уравнение

$$q(E) = \int_E^\infty \frac{dE'}{E'} \frac{\alpha_H(E')}{H(E')} q(E') + g(E). \quad (14)$$

После дифференцирования (14) по энергии нейтрона имеем

$$\frac{dq(E)}{dE} + \varphi(E) q(E) - \frac{dg(E)}{dE} = 0; \quad (15)$$

$$\varphi(E) \equiv \frac{1}{E} \frac{\alpha_H(E)}{H(E)}. \quad (16)$$

Решение дифференциального уравнения (15) имеет следующий вид:

$$q(E) = \left\{ C_1 + \int_0^E dE' \frac{dg(E')}{dE'} \exp \left[ \int_E^{E'} dE'' \varphi(E'') \right] \right\} \exp \left[ - \int_0^E dE' \varphi(E') \right]; \quad (17)$$

$$C_1 = - \int_0^\infty dE' \frac{dg(E')}{dE'} \exp \left[ \int_0^{E'} dE'' \varphi(E'') \right] \quad (18)$$

– константа, определяемая условием  $E \rightarrow \infty, \Psi(E) \rightarrow 0, q(E) \rightarrow 0$ .

Подставляя (18) в (17)

$$q(E) = - \int_E^{\infty} dE' \frac{dg(E')}{dE'} \exp \left[ \int_E^{E'} dE'' \varphi(E'') \right], \quad (19)$$

получаем

$$q(E) = g(E) + \int_E^{\infty} dE' g(E') \varphi(E') \exp \left[ \int_E^{E'} dE'' \varphi(E'') \right]. \quad (20)$$

Переходя от  $q(E)$  к  $\Psi(E)$  по формуле (13) и вспоминая определение (16) функции  $\varphi(E)$ , для искомого спектра быстрых и промежуточных нейтронов приходим к следующему итоговому ответу:

$$\Psi(E) = \frac{1}{H(E)} \left\{ g(E) + \int_E^{\infty} \frac{dE'}{E'} \frac{\alpha_H(E') g(E')}{H(E')} \exp \left[ \int_E^{E'} \frac{dE''}{E''} \frac{\alpha_H(E'')}{H(E'')} \right] \right\}. \quad (21)$$

Функция  $H(E)$  определена формулой (9). Точно такой же ответ получится при любом другом источнике нейтронов. Рассмотрим стационарную ( $\lambda = 0$ ) задачу в бесконечной ( $W = 0$ ) среде, состоящей из ядер водорода ( $H(E) = \alpha_H(E)$ ), при действии моноэнергетического источника  $g(E) = \delta(E - E_0)$ . Тогда из формулы (21) получается решение

$$\Psi(E) = \frac{\delta(E - E_0)}{\alpha_H(E_0)} + \frac{1}{E \alpha_H(E)}. \quad (22)$$

Если задан источник быстрых нейтронов ( $E_0 \geq 1$  МэВ), то вдали от него в области замедления, как известно, элементарное сечение рассеяния  $\sigma_H(E) = \text{const} = 20$  барн и, что следовало ожидать, получаем фермиевский спектр

$$\Psi(E) \sim \frac{1}{E}. \quad (23)$$

Очевидно, что в шкале летаргий  $u = \ln \left( \frac{E_0}{E} \right)$  это соответствует закону  $\Psi_u = \Psi(u) = \text{const}$ .

Сделаем следующее замечание. В целях упрощения формул выше молчаливо подразумевалось, что активный материал представлен каким-то одним делящимся изотопом. В случае смеси из разных  $i$ -х делящихся веществ в формулах (5), (8), (11) произведение  $\nu(E') \alpha_f(E')$  надо заменить на сумму  $\sum_i \nu_i(E') \alpha_{fi}(E')$ .

При этом предполагается, что делительный спектр у всех активных ядер одинаков, т. е.  $g_i(E) = g(E)$ . Обобщить представленные выше формулы на случай  $g_1(E) \neq g_2(E) \neq g_3(E) \neq \dots$  не представляет труда.

## 2. Спектр тепловых нейтронов

Для расчета спектра тепловых и эпитепловых нейтронов в бесконечной однородной среде справедлива

приближенная система дифференциальных уравнений Лалетина [2, 3]

$$\frac{dQ(z)}{dz} = G_a(z) N(z); \quad (24)$$

$$Q(z) = \frac{[\langle \xi \rangle G_s(z) M(z)]^2}{\langle \xi \rangle G_s(z) M(z) + \frac{d}{dz} [\langle \xi \rangle G_s M]} \times \frac{d}{dz} \frac{G_s N + \frac{\gamma}{\langle \xi \rangle} G_a N}{G_s M}, \quad (25)$$

где  $M(z) = \sqrt{z} e^{-z}$  – максвелловское распределение;  $z = \frac{E}{T}$  – безразмерная энергия нейтрона;  $N(z)$  – искомый спектр (безразмерная нейтронная плотность);  $G_a(z)$  и  $G_s(z)$  – соответствующие вероятности исчезновения и рассеяния нейтрона в единицу времени;  $\langle \xi \rangle$  – среднелогарифмическая потеря энергии нейтрона при столкновении с ядром;

$$\frac{\gamma}{\langle \xi \rangle} = \frac{1 - a + a \ln a - \frac{1}{2} a (1 - a) \ln^2 a}{(1 - a + a \ln a)^2}, \quad a = \left( \frac{A - 1}{A + 1} \right)^2; \quad (26)$$

$A$  – массовое число ядра;  $Q(z)$  – ток нейтронов по энергетической оси.

Система уравнений (24), (25) решается со следующими начальными условиями:

$$Q(0) = 0; \quad \frac{dQ(0)}{dz} = 0. \quad (27)$$

Отметим, что в случае  $A = 1, \langle \xi \rangle = 1, \gamma = 1$  при условии постоянства сечений  $\sigma_c = \text{const}, \sigma_s = \text{const}$  система уравнений Лалетина (24), (25) точна и эквивалентна дифференциальному уравнению Вигнера – Уилкинса [4]

$$\frac{d}{dz} \left\{ P(z) \frac{d}{dz} [N(z)(G_s + G_a)] \right\} - \left\{ R(z) [G_s(z) + G_a(z)] + \frac{e^{+z}}{\sqrt{z}} \right\} N(z) = 0; \quad (28)$$

$$P(z) = \frac{\sqrt{\pi z} e^z}{e^{-z} + \sqrt{\pi z} \operatorname{erf} \sqrt{z}}; \quad (29)$$

$$R(z) = \frac{P^2 e^{-2z}}{2\sqrt{\pi} z^{3/2}}. \quad (30)$$

Далее будем рассматривать бесконечную однородную водородосодержащую среду с малыми примесями поглотителя и делящегося материала и учитывать рассеяние нейтронов только на атомах водорода. Вероятности взаимодействия нейтронов с веществом в единицу времени выражаются так:

$$G_s(z) \approx G_H(z) = \frac{b_0}{2} \sqrt{\frac{T}{\pi z}} \int_0^\infty dz' \alpha_H(z') \left[ e^{(\sqrt{z} - \sqrt{z'})^2} - e^{-(\sqrt{z} + \sqrt{z'})^2} \right]; \quad (31)$$

$$G_a(z) = \frac{b_0}{2} \sqrt{\frac{T}{\pi z}} \sum_i \sqrt{A_i} \int_0^\infty dz' [\alpha_{ci}(z') + \alpha_{fi}(z')] \times \left\{ \exp \left[ A_i (\sqrt{z} - \sqrt{z'})^2 \right] - \exp \left[ A_i (\sqrt{z} + \sqrt{z'})^2 \right] \right\} + \lambda_\infty. \quad (32)$$

Суммирование ведется по всем компонентам смеси ядер ( $A_i$  – массовое число  $i$ -го ядра).

В случае тяжелых ядер  $\left( \frac{A_i z}{T} \gg 1 \right)$  интеграл (32)

берется методом перевала. Отсюда получаем

$$G_{ai}(z) \approx b_0 \sqrt{zT} (\alpha_{ci} + \alpha_{fi}) + \lambda_\infty.$$

Если система конечна, то следует сделать замену

$$\lambda_\infty \rightarrow \lambda, \quad G_a(z, \lambda_\infty) \rightarrow G_a(z, \lambda) + b_0 \sqrt{zT} W(z). \quad (33)$$

В диффузионном приближении, например, в случае однородного шара

$$W(z) = \frac{\pi l_{tr}(z)}{3R_+^2}, \quad (34)$$

где  $l_{tr}$  – транспортный пробег нейтрона;  $R_+$  – экстраполированный радиус шара.

Положив  $\langle \xi \rangle = 1$ ,  $\gamma = 1$  (изменение энергии нейтрона учитывается только при столкновениях с ядрами водорода), в системе (24), (25) сделаем замену

$$N(z) = \frac{1}{G_a(z) + G_s(z)} [X(z)M(z)G_s(z) - Q(z)]. \quad (35)$$

Тогда получим

$$\frac{dX}{dz} = \frac{1}{G_a + G_s} \left[ G_a X + \frac{Q}{M} \right]; \quad (36)$$

$$\frac{dQ}{dz} = \frac{G_a}{G_a + G_s} [G_s X M - Q]; \quad (37)$$

$$Q(0) = 0; \quad X(0) = \frac{G_a(0) + G_s(0)}{G_s(0)}. \quad (38)$$

Переход от (24), (25) к системе дифференциальных уравнений (36), (37) избавляет от необходимости вычислять производные  $G'_a$  и  $G'_s$ . При  $z \rightarrow 0$  в соотношении (37) возникает особенность и оно переходит в

$$\frac{dX}{dz} = \frac{G_a}{G_s} \left( 1 + \frac{2}{3} z \right). \quad (39)$$

При отсутствии поглощения решением уравнений (36), (37) является  $N(z) = M(z)$ . Это очевидный результат. Действительно, отличие спектра термализованных нейтронов от максвелловского (а оно существенно) связано с зависимостью сечения  $\sigma_c$  от энергии. Там, где  $\sigma_c$  велико, происходит "выедание" спектрального диапазона.

Система (36), (37) в рассматриваемом случае слабого поглощения имеет следующие предельные аналитические решения. При  $z \ll 1$

$$Q(z) \sim z^{3/2}; \quad N(z) \sim \sqrt{z}. \quad (40)$$

В асимптотическом пределе  $z \gg 1$  решением является фермиевский энергетический спектр (см. также (23))

$$Q(z) = \text{const}; \quad N(z) \sim \frac{1}{z^{3/2}};$$

$$\Phi(z) = \sqrt{z} N(z) \sim \frac{1}{z} \sim \frac{1}{E}. \quad (41)$$

### 3. Определение $\lambda$ и $K_{\Phi}$

Сшивая усредненные по объему решения разделов 1, 2 в точке  $E_* = 20T \gg T$ , находим функцию распределения  $\Psi(E, \lambda)$  при произвольной энергии нейтрона  $0 \leq E \leq \infty$ . Собственное значение  $\lambda$  определяется из уравнения баланса нейтронов

$$K(\lambda) = \int_0^\infty dE \Psi(E, \lambda) \times \left\{ [v(E) - 1] \alpha_f(E) - \alpha_c(E) - W(E) - \frac{\lambda}{V(E)} \right\} = 0. \quad (42)$$

Нетрудно убедиться, что

$$K_{\Phi} = 1 + K(\lambda = 0). \quad (43)$$

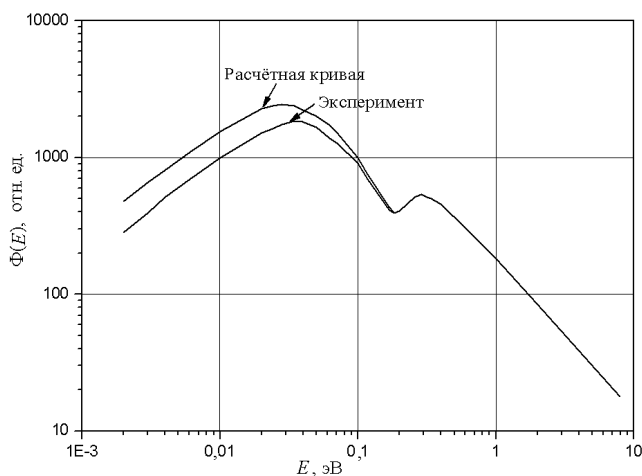
### 4. Результаты численных расчетов

Так как спектр нейтронов  $\Psi(E, \lambda)$  параметрически зависит от  $\lambda$ , то уравнение (42) решалось численно (использовался быстро сходящийся метод последовательных приближений).

Всюду выше функция  $W(E)$  предполагалась известной. Однако для ее определения нет достаточно точной аналитической формулы. Величина  $W(E)$  определялась интерполяционной формулой, которая была получена на основе диффузионного приближения с калибровкой на численные расчеты по методике "Монте-Карло".

Были выполнены расчеты параметра  $\lambda(T) = \lambda_{\infty}(T)$  при различных значениях температуры среды  $T$  для случаев бесконечных по размерам систем, состоящих из механических смесей урана с полиэтиленом. Расчеты, в частности, подтвердили тот известный факт, что уран-233 в качестве делящегося материала в водородосодержащей среде значительно более эффективен, чем уран-235.

В качестве примера на рисунке приведены результаты измерений спектра нейтронов в водном растворе сульфата кадмия [5] и соответствующего расчета.



Сравнение расчетного потока  $\Phi(E) = \sqrt{EN(E)}$  с измеренным в эксперименте в водном растворе сульфата кадмия

Расхождение расчета с экспериментом наблюдается в области малых энергий нейтронов, так как в ней становится существенным учет влияния химических связей при рассеянии нейтронов на молекулах  $H_2O$ . Напомним, что в разделе 2 была принята газовая модель, т. е. атомы предполагались свободными. Уточнить полученные выше формулы за счет учета химических связей Н и О можно, например, путем использования модели Нэлкина для воды [5].

Авторы выражают благодарность С. С. Жихареву, В. А. Кутвицкому, В. С. Нефедову и Б. В. Певницкому за полезные обсуждения затронутых в статье вопросов.

Аналитические формулы запрограммировал и провел все численные расчеты В. М. Повышев.

## Список литературы

1. Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Изд-во Главного управления по использованию атомной энергии при Совете Министров СССР, 1960.
2. Лалетин Н. И. Дифференциальные уравнения для термализации нейтронов в бесконечных однородных средах. М.: Атомная физика, 1963. Т. 14. Вып. 5. С. 402.
3. Лалетин Н. И. Спектры медленных нейтронов в воде с поглотителями. М.: Атомная физика, 1964. Т. 16. Вып. 5. С. 142.
4. Коген Е. Экспериментальные реакторы и физика реакторов // Доклады иностранных ученых на Международной конференции по мирному использованию атомной энергии (1955 г., г.Женева). М: Гостехиздат. 1956. С. 257.
5. Nelkin M. S. // Phys.Rev. 1961. Vol. 119. P. 741.

Статья поступила в редакцию 09.10.2008.

# НОВЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ НЕЙТРОНОВ

Н. Б. Бабичев, Б. В. Беженцев, П. С. Бондарев

ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", 607188, г. Саров Нижегородской обл.

Найдены приближенные аналитические решения трансцендентных уравнений, которые в асимптотической диффузионной теории решаются совместно с уравнением диффузии нейтронов. Полученные аналитические выражения оказались столь точными, что необходимость численного решения трансцендентных уравнений исчезла. В результате этого явную зависимость коэффициентов диффузии нейтронов от различных параметров удалось выразить аналитическими формулами, которые в рамках асимптотической теории не нуждаются в дальнейшем уточнении.

## Введение

Если односкоростное кинетическое уравнение с изотропным ядром интеграла столкновений проинтегрировать по углам, то получим

$$\frac{\partial n(t, \vec{r})}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j}(t, \vec{r}) = (\beta - \alpha) V n(t, \vec{r}), \quad (1)$$

где  $V$  – скорость нейтронов;  $\alpha = n_{\text{я}} (\sigma_s + \sigma_f + \sigma_c)$ ,  $\beta = h\alpha$  – так называемые параметры Пайерлса (далее

будем считать, что они постоянны);  $h = \frac{\nu \sigma_f + \sigma_s}{\sigma_s + \sigma_f + \sigma_c}$  –

активность среды;  $n_{\text{я}}$  – плотность ядер;  $\sigma_s, \sigma_f, \sigma_c$  – микроскопические сечения рассеяния, деления и захвата;  $\nu$  – среднее количество нейтронов, рождающихся в одном акте деления ядра;  $n(t, \vec{r})$  и  $\vec{j}(t, \vec{r})$  – соответственно нейтронная плотность и векторный поток нейтронов в точке с радиусом-вектором  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ .

В диффузионном приближении справедлив известный закон Фика

$$\vec{j} = -D \operatorname{grad}(n), \quad (2)$$

использование которого превращает (1) в уравнение диффузии (его надо решать с соответствующими начальными и граничными условиями);  $D$  – коэффициент диффузии.

Очевидно, что достоверность решений уравнения диффузии существенно зависит от точности, с которой определен коэффициент диффузии  $D$ . Таким образом, значение коэффициента диффузии по существу и решает вопрос о целесообразности использования диффузионного приближения в целях упрощения решения од-

носкоростных задач нейтронной кинетики. Если в элементарной теории  $D$  выражается простой формулой

$$D = D_0 = \frac{V}{3\alpha}, \quad (3)$$

то в асимптотической диффузионной теории [1] (см. также [2, 3]) для определения  $D$  требуются численные решения некоторых трансцендентных уравнений. Из-за этого теряется наглядность рабочих формул.

С целью упрощения анализа результатов асимптотической диффузионной теории в данной работе ведется поиск явных аналитических решений указанных трансцендентных уравнений.

В разделе 1, где принято стационарное приближение, кратко представлены основные известные соотношения асимптотической диффузионной теории, определены искомые аналитические решения и изучен вопрос об их точности.

Раздел 2 посвящен обобщению результатов на случай квазистационарных объектов.

## 1. Стационарное уравнение диффузии в асимптотической теории и аналитические решения трансцендентных уравнений

### 1.1. Некоторые известные результаты

Значительно более точная, чем элементарная, асимптотическая теория возникла (см. [1, 2, 3]) в результате калибровки решения уравнения диффузии на известное точное решение уравнения переноса нейтронов в бесконечной среде.

В случае размножающей нейтроны среды ( $h > 1$ ) стационарное диффузионное уравнение

$$\nabla^2 n(\vec{r}) + \alpha^2 k^2 n(\vec{r}) = 0 \quad (4)$$

решается совместно с трансцендентным уравнением

$$h \operatorname{Arctg}(k) = k, \quad (5)$$

и для коэффициента диффузии справедливо соотношение

$$D(h) = \frac{(h-1)V}{\alpha k^2}. \quad (6)$$

Отметим, что стационарное уравнение (4) справедливо в случае критических систем из делящихся материалов.

Если  $h < 1$  (нейтронопоглощающая среда), то

$$\nabla^2 n(\bar{r}) - \alpha^2 k^2 n(\bar{r}) = 0; \quad (7)$$

$$h \operatorname{Arcth}(k) = k; \quad (8)$$

$$D(h) = \frac{(1-h)V}{\alpha k^2}. \quad (9)$$

Для инертного вещества  $D(h=1) = \frac{V}{3\alpha}$ .

## 1.2. Приближенные аналитические решения трансцендентных уравнений

**Решения нулевого приближения.** Рассмотрим сначала случай размножающей среды ( $h > 1$ ). Для удобства перепишем уравнение (5) в тождественной форме

$$1 - \varphi \operatorname{ctg} \varphi = \frac{h-1}{h}; \quad (\varphi = \operatorname{Arctg}(k); \quad k = \operatorname{tg} \varphi). \quad (10)$$

Имеем следующее разложение:

$$\varphi \operatorname{ctg} \varphi = 1 - \sum_{m=1}^{\infty} A_m \varphi^{2m}; \quad (11)$$

$$A_m = \frac{2^m}{(2m)!} B_m; \quad (12)$$

$B_m$  – числа Бернулли;  $A_1 = \frac{1}{3}$ ;  $A_2 = \frac{1}{45}$ ;  $A_3 = \frac{2}{945}$ ;

$$A_4 = \frac{1}{4725}.$$

Уравнение (10) преобразуем так:

$$\varphi^2 + \frac{\varphi^4}{15} = \psi(\varphi, h); \quad (13)$$

$$\psi(h, \varphi) = 3 \left( \frac{h-1}{h} - \sum_{m=3}^{\infty} A_m \varphi^{2m} \right). \quad (14)$$

Если в правой части соотношения (13) положить

$$\psi = \psi^{[0]}(h) = \frac{3(h-1)}{h}, \quad (15)$$

то из (13) следует

$$\begin{aligned} \varphi^{[0]} &= \left[ \frac{15}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{4}{15} \psi^{[0]}} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}} = \\ &= \left[ \frac{15}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{4(h-1)}{5h}} - 1 \right) \right]^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (16)$$

Приняв  $\psi^{[1]} = 3 \left( \frac{h-1}{h} - \frac{2}{945} (\varphi^{[0]})^6 \right)$ , получим

$$\varphi^{[1]} = \left\{ \frac{15}{2} \left( \sqrt{1 + \frac{4}{5} \left( \frac{h-1}{h} - \frac{2}{945} (\varphi^{[0]})^6 \right)} - 1 \right) \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (17)$$

Явный вид формулы (17) громоздок, но она полезна. Действительно, из нее и аналогичных соотношений для  $\varphi^{[j]}$  при  $j \geq 2$  вытекает, что величина  $\varphi^{[0]}$  завышена,

т. е.  $\varphi^{[0]} > \varphi$ . Поэтому напрашивается попытка так упростить формулу (16), чтобы это привело к некоторому другому значению  $\varphi_0$ , которое меньше исходного. Для этого сознательно оборвем разложение функции  $F(x) = \sqrt{1+ax}$  квадратичным членом:

$F(x) \approx 1 + \frac{ax}{2} - \frac{a^2 x^2}{8}$ . В таком случае вместо (16) получим

$$\varphi_0 = \left\{ \frac{15}{2} \frac{4}{10} \left( \frac{h-1}{h} \right) \left[ 1 - \frac{4}{20} \left( \frac{h-1}{h} \right) \right] \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (18)$$

После простых выкладок из этого вытекает искомое решение нулевого приближения

$$\varphi_0(h) = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{3}{5} (h-1)(4h+1)}; \quad (19)$$

$$k_0(h) = \sqrt{\frac{3}{5} (h-1)(4h+1)}. \quad (20)$$

В итоге вместо решения системы из двух уравнений (4), (5) теперь с теми же начальным и граничными условиями достаточно решить одно уравнение диффузии

$$\nabla^2 n(\bar{r}) + \frac{3}{5} (h-1)(4h+1) \alpha^2 n(\bar{r}) = 0. \quad (21)$$

Полученное аналитическое решение приводит к следующему коэффициенту диффузии нейтронов:

$$D_0(h) = \frac{5V}{3\alpha(4h+1)}. \quad (22)$$

Очевидно, что при  $h=1$  (инертная среда), как и должно быть, выполняется равенство

$$D_0(h=1) = \frac{V}{3\alpha}. \quad (23)$$

Пусть теперь  $h < 1$ . При замене  $\varphi \rightarrow i\varphi$ , где  $i$  – мнимая единица, уравнение (8) переходит в (5). Отсюда следует, что

$$\varphi_0(h < 1) = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{3}{5} (1-h)(4h+1)}. \quad (24)$$

Таким образом, при любых значениях активности в нулевом приближении справедливо решение

$$\varphi_0(h) = \frac{1}{h} \sqrt{\frac{3}{5} |h-1|(4h+1)}. \quad (25)$$

Легко показать, что уравнение (21) и формула (22) для коэффициента диффузии имеют место при произвольных  $h$ .

Элементарная теория диффузии, как известно, требует выполнения неравенства

$$|h-1| \ll 1, \quad (26)$$

а условие справедливости асимптотической теории является менее жестким. Поэтому в подразделе 1.4 рассматривается достаточно широкий диапазон  $0,5 \leq h \leq 2$  изменения активности среды.

### 1.3. Уточненные аналитические решения

Рассмотрим случай  $h > 1$  и будем решать уравнение (10). Уточненное решение уравнения  $h\varphi = \text{tg}(\varphi)$  будем искать в виде  $\varphi_1 = \varphi_0 + \Delta\varphi$ , где  $|\Delta\varphi| \ll \varphi_0$ . Записав тангенс суммы, заменим  $\text{tg}(\Delta\varphi) \approx \Delta\varphi$  и получим поправку к  $\varphi_0$

$$\Delta\varphi = \frac{h\varphi_0 - \text{tg}(\varphi_0)}{1 - h + h\varphi_0 \text{tg}(\varphi_0)} \approx \frac{h\varphi_0 - \text{tg}(\varphi_0)}{1 - h + (h\varphi_0)^2}. \quad (27)$$

Таким образом, искомая функция имеет вид

$$\varphi_1 = \varphi_0 + \frac{h\varphi_0 - \text{tg}(\varphi_0)}{1 - h + (h\varphi_0)^2}, \quad (28)$$

где  $\varphi_0$  определяется формулой (25).

Нет необходимости рассматривать отдельно случай  $h < 1$ . Произведем замену в (28)  $\varphi_0 \rightarrow i\varphi_0$ ,  $\varphi_1 \rightarrow i\varphi_1$  и сразу получим искомый ответ

$$\varphi_1 = \varphi_0 + \frac{h\varphi_0 - \text{th}(\varphi_0)}{1 - h - (h\varphi_0)^2}. \quad (29)$$

Нулевое приближение можно записать в виде одного выражения сразу для двух случаев, а для первого приближения так сделать нельзя.

Если в выражениях (28) и (29) вместо  $\varphi_0$  подставить  $\varphi_1$ , то можно получить второе приближение и так далее.

Выражения для  $k_1$  и  $D_1$  аналогичны формулам для  $k_0$  и  $D_0$ , нужно только заменить  $\varphi_0$  на  $\varphi_1$ :

$$k_1 = h\varphi_1; \quad (30)$$

$$D_1 = \frac{|h-1|V}{\alpha k_1^2}, \quad (31)$$

где  $\varphi_1$  имеет вид (28) или (29) в зависимости от знака  $(h-1)$ .

Если в формулы (30) и (31) подставить  $\varphi_1 = \varphi_0 + \Delta\varphi$  и разложить их по параметру  $\Delta\varphi/\varphi_0$ , то можно записать:

$$k_1 = k_0 + \Delta k, \quad \Delta k = h\Delta\varphi; \quad (32)$$

$$D_1 = D_0 - \Delta D, \quad \Delta D = D_0 \frac{2\Delta\varphi}{\varphi_0}. \quad (33)$$

### 1.4. О точности полученных аналитических решений

Итак, нами были получены приближенные формулы (22) и (33) для коэффициента диффузии в нулевом и первом приближении.

Проверим, насколько точны эти формулы на примере нескольких систем в случаях поглощающих ( $h < 1$ ) и размножающих ( $h > 1$ ) нейтроны веществ. Ниже приведена таблица, включающая значения для коэффициента диффузии, промежуточные вычисления и относительные ошибки (в процентах) на отрезке  $0,5 \leq h \leq 2$ . Помимо ранее использованных обозначений введены следующие:

$$\delta\varphi_i = \frac{|\varphi - \varphi_i|}{\varphi} 100\%, \quad i = 0, 1;$$

$$d = \frac{D}{D_3} = \frac{3|h-1|}{k^2}, \quad D_3 = D(h=1) = \frac{V}{3\alpha};$$

$$d_i = \frac{3|h-1|}{k_i^2}, \quad i = 0, 1;$$

$$\delta d_i = \frac{|d - d_i|}{d} 100\%, \quad i = 0, 1;$$

$D_3$  – коэффициент диффузии в элементарной теории.

Для  $k$  не приводятся значения относительных ошибок, потому что они слабо отличаются от ошибок для  $\varphi$ .

Зависимости коэффициентов диффузии и других параметров от активности среды

$h$	0,5	0,7	0,8	0,9	1,1	1,5	1,7	2,0
$\varphi$	1,91501	1,18376	0,88801	0,58381	0,51751	0,96740	1,06693	1,16556
$\varphi_0$	1,89737	1,18149	0,88741	0,58373	0,51746	0,96609	1,06469	1,16190
$\varphi_1$	1,91569	1,18378	0,88802	0,58381	0,51751	0,96740	1,06693	1,16554
$\delta\varphi_0(\%)$	0,92122	0,19211	0,06788	0,01379	0,00962	0,13550	0,20985	0,31454
$\delta\varphi_1(\%)$	0,03545	0,00102	0,00011	0,00001	$< 10^{-5}$	0,00002	0,00029	0,00146
$k$	0,95750	0,82863	0,71041	0,52543	0,56926	1,45110	1,81378	2,33112
$k_0$	0,94868	0,82704	0,70993	0,52536	0,56921	1,44914	1,80997	2,32379
$k_1$	0,95784	0,82864	0,71041	0,52543	0,56926	1,45110	1,81377	2,33109
$d$	1,63610	1,31074	1,18886	1,08666	0,92575	0,71235	0,63834	0,55207
$d_0$	1,66667	1,31579	1,19048	1,08696	0,92593	0,71429	0,64103	0,55556
$d_1$	1,63494	1,31071	1,18886	1,08666	0,92575	0,71235	0,63834	0,55208

$\delta d_0(\%)$	1,86822	0,38533	0,13589	0,02759	0,01923	0,27156	0,42102	0,63206
$\delta d_1(\%)$	0,07087	0,00205	0,00021	0,00002	$< 10^{-5}$	0,00003	0,00058	0,00291

## 2. Обобщение результатов на случай квазистационарных систем

Уравнение диффузии нейтронов

$$\frac{\partial n(t, \vec{r})}{\partial t} - D \nabla^2 n(t, \vec{r}) = (\beta - \alpha) V n(t, \vec{r}) \quad (34)$$

в квазистационарном случае

$$n(t, \vec{r}) = e^{\lambda t} n(\vec{r}) \quad (35)$$

принимает следующий вид:

$$D \nabla^2 n(\vec{r}) + \left( h - 1 - \frac{\lambda}{\alpha V} \right) \alpha V n(\vec{r}) = 0 \quad (36)$$

и

$$\nabla^2 n(\vec{r}) + \frac{(h-1-\Lambda)\alpha V}{D} n(\vec{r}) = 0, \quad (37)$$

где

$$\Lambda = \frac{\lambda}{\alpha V}. \quad (38)$$

### 2.1. Исходные соотношения

В случае размножающих нейтроны квазистационарных систем из делящихся материалов ( $h > 1$ ) имеют место следующие формулы (они при  $\lambda = \Lambda = 0$  переходят в соотношения подраздела 1.1):

$$D = \frac{(h-1-\Lambda)V}{\alpha(1+\Lambda)^2 k^2}; \quad (39)$$

$$k = H \operatorname{Arctg}(k) \quad (40)$$

или

$$H\varphi = \operatorname{tg}(\varphi); \quad \varphi = \operatorname{Arctg}(k). \quad (41)$$

Здесь и далее используется обозначение

$$H = \frac{h}{1+\Lambda}. \quad (42)$$

Уравнение диффузии при  $h > 1$  можно записать так:

$$\nabla^2 n(\vec{r}) + [(1+\Lambda)\alpha k]^2 n(\vec{r}) = 0. \quad (43)$$

В случае поглотителя нейтронов ( $h < 1$ )

$$D = \frac{(1-h+\Lambda)V}{\alpha(1+\Lambda)^2 k^2}. \quad (44)$$

Параметр  $k$  при  $h < 1$  определяется из трансцендентного уравнения

$$H \operatorname{Arcth}(k) = k, \quad (45)$$

что эквивалентно уравнению

$$H\varphi = \operatorname{th}(\varphi), \quad \varphi = \operatorname{Arcth}(k). \quad (46)$$

Если  $h < 1$ , то квазистационарное уравнение можно записать следующим образом:

$$\nabla^2 n(\vec{r}) - [(1+\Lambda)\alpha k]^2 n(\vec{r}) = 0. \quad (47)$$

### 2.2. Приближенные аналитические формулы

В разделе 1 были определены аналитические решения трансцендентных уравнений (5) и (8) при значении  $H = h$ . Поэтому искомые здесь формулы получаются из соотношений раздела 1 путем простой замены  $h \rightarrow H$  в последних. Остается лишь выписать соответствующие итоговые формулы.

#### 2.2.1. Нулевое приближение

$$\varphi_0 = \frac{1}{H} \sqrt{\frac{3}{5}} |H-1| (4H+1); \quad (48)$$

$$k_0 = H\varphi_0. \quad (49)$$

При любых значениях активности  $h$  коэффициент диффузии вычисляется по формуле

$$D_0 = \frac{5V}{3(4h+1+\Lambda)\alpha} \quad (50)$$

и справедливо уравнение диффузии

$$\nabla^2 n(\vec{r}) + \frac{3}{5}(h-1-\Lambda)(4h+1+\Lambda)\alpha^2 n(\vec{r}) = 0. \quad (51)$$

Уравнение диффузии для случаев  $h > 1$  и  $h < 1$  соответственно можно записать следующим образом:

$$\nabla^2 n(\vec{r}) + [(1+\Lambda)\alpha k_0]^2 n(\vec{r}) = 0, \quad h > 1; \quad (52)$$

$$\nabla^2 n(\vec{r}) - [(1+\Lambda)\alpha k_0]^2 n(\vec{r}) = 0, \quad h < 1. \quad (53)$$

Для коэффициента диффузии справедливы следующие частные формулы:

$$D_0(h=1, \Lambda=0) = \frac{V}{3\alpha}; \quad (54)$$

$$D_0(h, \Lambda=\Lambda_\infty) = \frac{V}{3h\alpha} = \frac{V}{3\beta}; \quad (55)$$

$\Lambda_\infty = \frac{\lambda_\infty}{\alpha V}$ ;  $\lambda_\infty = (h-1)V\alpha$  – значения  $\lambda$  в бесконечной среде.

#### 2.2.2. Первое приближение

Произведя замену  $h \rightarrow H$  в формулах (27)–(33), получим

$$\varphi_1 = \varphi_0 + \frac{H\varphi_0 - \operatorname{tg}(\varphi_0)}{1-H+(H\varphi_0)^2}, \quad h > 1; \quad (56)$$

$$\varphi_1 = \varphi_0 + \frac{H\varphi_0 - \operatorname{th}(\varphi_0)}{1-H-(H\varphi_0)^2}, \quad h < 1; \quad (57)$$

$$k_1 = H\varphi_1; \quad (58)$$

$$D_1 = D_0 - \Delta D, \quad \Delta D = D_0 \frac{2\Delta\varphi}{\varphi_0}; \quad (59)$$

$$\Delta\varphi = \frac{H\varphi_0 - \operatorname{tg}(\varphi_0)}{1-H+(H\varphi_0)^2}, \quad h > 1; \quad (60)$$

$$\Delta\varphi = \frac{H\varphi_0 - \operatorname{th}(\varphi_0)}{1-H-(H\varphi_0)^2}, \quad h < 1. \quad (61)$$



Следует заметить, что при  $h > 1$  и  $h < 1$  соответственно  $H > 1$  и  $H < 1$ . Это связано с выполнением для всех реальных систем неравенства  $|\Lambda| \leq |\Lambda_\infty| = |h - 1|$ . Поэтому в формулах, справедливых для квазистационарных систем, также разделяются только среды, размножающие и поглощающие нейтроны.

### 2.2.3. Характер зависимости коэффициента диффузии

от активности среды и от  $\Lambda = \frac{\lambda}{\alpha V}$

На рис. 1–3 представлены зависимости относительных коэффициентов диффузии нейтронов

$$d = \frac{D}{D(h=1, \Lambda=0)}, \quad d_0 = \frac{D_0}{D_0(h=1, \Lambda=0)},$$

$$d_1 = \frac{D_1}{D_1(h=1, \Lambda=0)}$$

от  $\xi = \frac{\Lambda}{\Lambda_\infty}$  при различных значениях активности  $h$ .

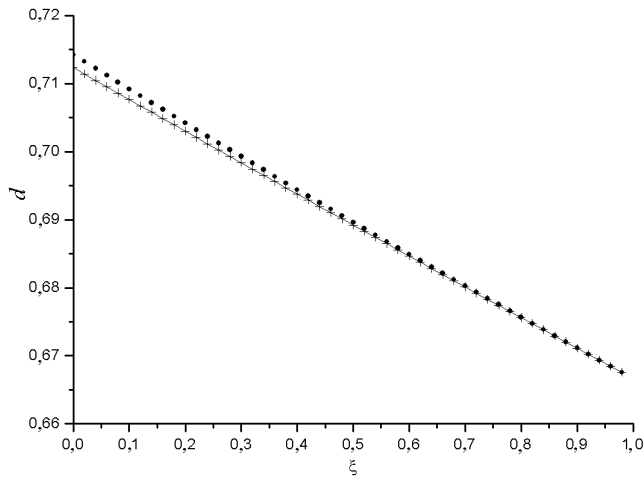


Рис. 1. Зависимость  $d(\xi)$  – сплошная кривая,  $d_0(\xi)$  – кружочки,  $d_1(\xi)$  – крестики при  $h = 1,5$

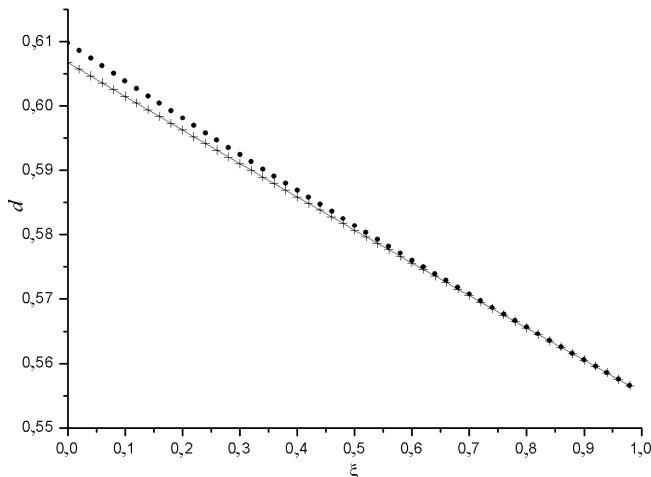


Рис. 2. Зависимость  $d(\xi)$  – сплошная кривая,  $d_0(\xi)$  – кружочки,  $d_1(\xi)$  – крестики при  $h = 1,8$

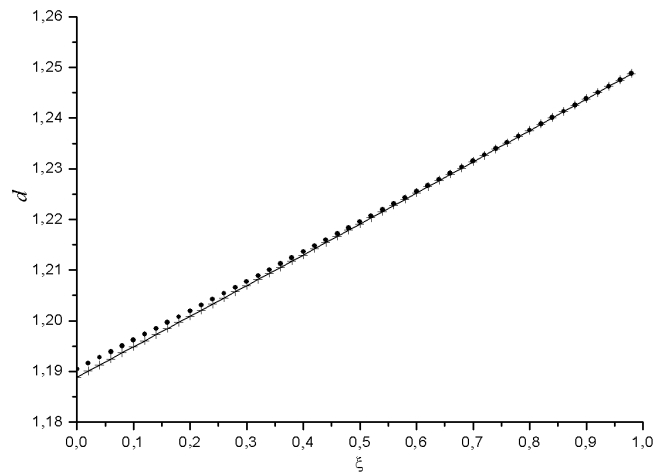


Рис. 3. Зависимость  $d(\xi)$  – сплошная кривая,  $d_0(\xi)$  – кружочки,  $d_1(\xi)$  – крестики при  $h = 0,8$

Из рис. 1–3 видно, что уже нулевое приближение имеет высокую точность, а различие между коэффициентами диффузии  $d$  и  $d_1$  отсутствует.

## Список литературы

1. Романов Ю. А. Критические параметры реакторных систем. Точные решения односкоростного кинетического уравнения и их использование для решения диффузионных задач (усовершенствованный диффузионный метод). М.: Госатомиздат, 1960. С. 3–26.
2. Дэвисон Б. Теория переноса нейтронов. М.: Изд-во Главного управления по использованию атомной энергии при Совете Министров СССР, 1960.
3. Кейз К., Цвайфель П. Линейная теория переноса. М.: Изд-во "Мир", 1972.

Статья поступила в редакцию 21.10.2008.

## ОБРАТНОЕ КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЙЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СЛОИСТЫХ СРЕДАХ

А. Ю. Ставцев, Ю. В. Штоцкий

Московский инженерно-физический институт (государственный университет)  
E.-mail: a210883s@yandex.ru

Исследованы вклады в поле прошедшего и отраженного излучения гамма-квантов с энергией 100–400 кэВ, претерпевших однократное и многократное рассеяние. Расчеты проводились методом Монте-Карло с использованием генератора псевдослучайных чисел Knuth's. Были рассмотрены случаи неограниченного по площади  $(x, y)$  и ограниченного  $(30 \times 30 \text{ мм})$  образцов из алюминия толщиной  $t$ . Для полубесконечной среды из алюминия, железа, олова и свинца получены зависимости альbedo, потока отраженной энергии и характерных размеров активного пятна отраженного излучения. Исследовано также влияние состава гетерогенной композиции на поток отраженной энергии и размеры активного пятна.

### Введение

Рентгеновское излучение было открыто в 1895 году. Почти сразу после открытия оно стало применяться для просвечивания тела человека и других объектов. В технике и медицине широко применяются методы рентгеновской визуализации внутренней структуры объектов уже более ста лет.

Все традиционные методы рентгеновской визуализации основаны на трансмиссионном принципе, при котором регистрируется излучение, прошедшее через объект (нерассеянное). По получаемой проекции нельзя однозначно судить о распределении плотности в объекте. В рентгеновской компьютерной томографии (РКТ) измеряется большое число проекций и с помощью специальных математических алгоритмов производится восстановление распределения коэффициента линейного ослабления.

Однако не всякий объект и не всегда может быть помещен в томограф. Не всегда и приемник излучения может быть помещен за объектом. Например: крупногабаритные конструкции или диагностика стен тоннелей; неразрушающий контроль качества дорожного покрытия и т. д. В этом случае возникает необходимость "одностороннего" контроля внутренней структуры объектов. Эту задачу можно решать с помощью регистрации отраженного рентгеновского излучения.

Под отраженным излучением понимается однократно или многократно обратно рассеянное излучение самого источника, а также вторичное излучение того же вида, что и излучение источника, возникающее в

результате взаимодействия первичного излучения со средой. Для фотонов таковым является тормозное, характеристическое, аннигиляционное и флуоресцентное излучение. Отношение отраженного потока излучения к потоку падающему называется альbedo [1].

Рентгеновское и гамма-излучение при прохождении через вещество взаимодействует с электронами атомных оболочек и рассеивается в интервале углов от 0 до 180 градусов. Эти гамма-кванты несут информацию о плотности и атомном номере вещества, на котором они рассеялись. Интенсивность обратно рассеянного излучения для веществ с меньшей плотностью и меньшим атомным номером выше, чем для веществ с большей плотностью и большим атомным номером [2]. Перечислим возможные области применения сканеров обратного рассеяния:

- таможенный досмотр автотранспорта и багажа пассажиров;
- диагностика лопастей вертолетов в собранном виде;
- диагностика сварных швов трубопроводов и стен тоннелей;
- контроль толщины и качества дорожного покрытия;
- проверка качества несущих конструкций при монолитном строительстве;
- поиск тайников с боеприпасами и наркотиками;
- проверка герметичности тепловыделяющих элементов ядерных реакторов;
- поиск жучков внутри стен и других каналов утечки информации;

- диагностика онкологических заболеваний молочных желез у женщин.

## 1. Многократное рассеяние в алюминии

Были исследованы вклады в поле прошедшего и отраженного излучения гамма-квантов с энергией 150 кэВ, претерпевших однократное и многократное рассеяние. Расчеты проводились методом Монте-Карло с использованием генератора случайных чисел Knuth's [3]. Были рассмотрены случаи неограниченного по площади ( $x, y$ ) и ограниченного ( $30 \times 30$  мм) образцов из алюминия. Моноэнергетический луч фотонов падал в центр пластины под углом  $0^\circ$  и  $10^\circ$  от нормали. При анализе данных учитывались только фотоны, вышедшие через горизонтальные поверхности  $z = 0$  и  $z = t$ , где  $t$  – толщина слоя.

Энергия источника 150 кэВ, отсечка по энергии прошедшего излучения 149,9999 кэВ – для отсека первичного излучения, а также фотонов, рассеянных на малые углы, почти без потери энергии. Расходимость пучка 0,05 радиан. Статистика 10 млн. событий источника. Исследуемый диапазон: от 2 до 50 мм, шаг по толщине 2 мм.

На рис. 1 представлены полученные зависимости интегрального альbedo и интенсивности прошедшего рассеянного излучения от толщины слоя вещества. Для альbedo (рис. 1,а,б) наблюдается экспоненциальное возрастание интенсивности при малых толщинах с дальнейшим выходом на плато. Для ограниченного образца выход на плато происходит быстрее и при меньшем значении интенсивности насыщения. Примерно до 5 мм по толщине графики с учетом рассеяний разной кратности совпадают.

Для прошедшего однократно рассеянного излучения количество рассеянных фотонов сначала растет, достигает некоторого максимума и начинает плавно падать. Это происходит из-за того, что сначала с ростом толщины образца растет количество взаимодействовавших фотонов. При дальнейшем увеличении толщины образца кванты, рассеянные на большие углы относительно начального направления, имеют меньшую вероятность выйти из вещества, не претерпев еще, как минимум, одного рассеяния. Это приводит к некоторому сужению пика прошедшего излучения. Аналогичные рассуждения можно провести и для других графиков. Для ограниченного образца спад более резкий и начинается раньше. При учете рассеяний большей кратности пик смещается в сторону больших толщин и становится шире.

На рис. 2 представлены процентные вклады рассеяний разной кратности в интегральное альbedo в зависимости от толщины образца алюминия ограниченной ( $30 \times 30$  мм) и неограниченной площади. Как видно из графиков, до определенной толщины слоя количество отраженных фотонов, претерпевших двух и трехкратное рассеяние, растет, а затем выходит на плато. При ограничении размеров образца доля однократно

рассеянных отраженных фотонов возрастает в среднем на 10 %. Это происходит из-за квантов, рассеивающихся под прямым углом и выходящих через боковую поверхность образца.

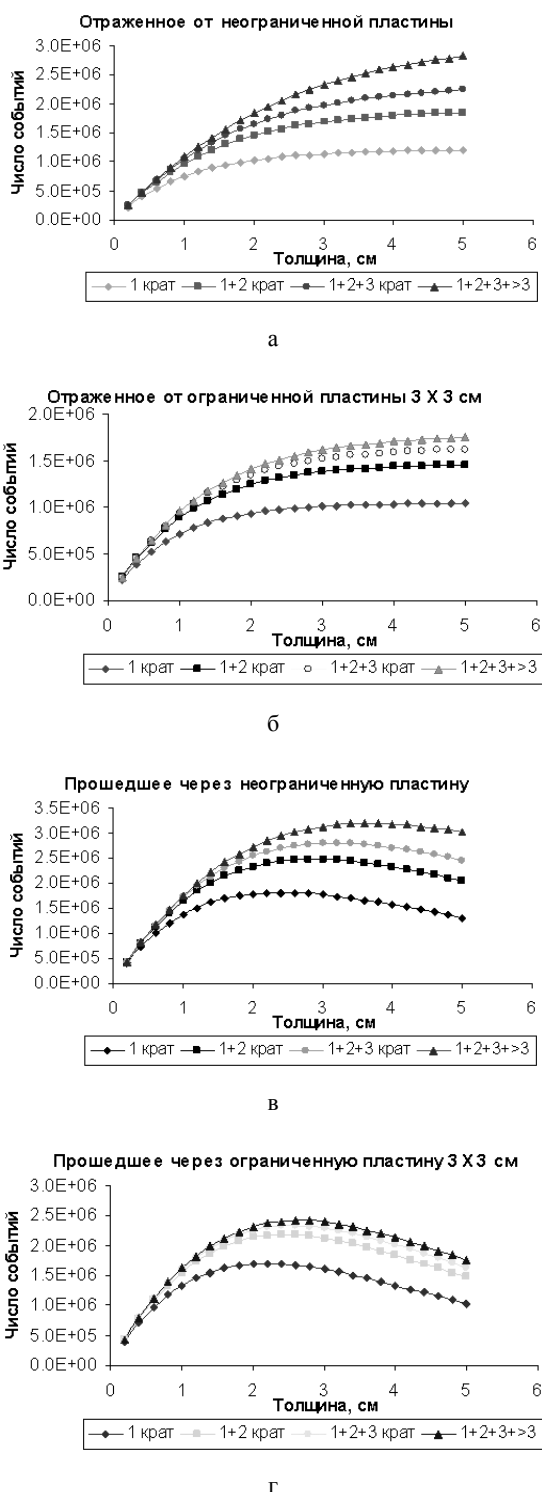


Рис. 1. Зависимость интегрального числового альbedo (а, б) и интенсивности прошедшего рассеянного излучения (в, г) от толщины образца алюминия, неограниченного по площади и размером  $30 \times 30$  мм

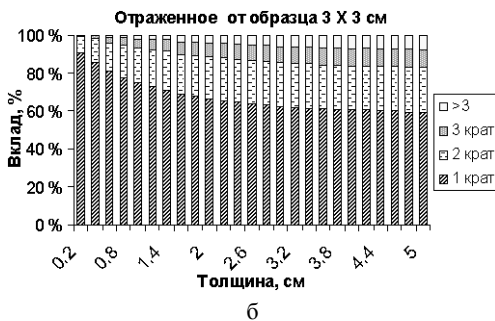
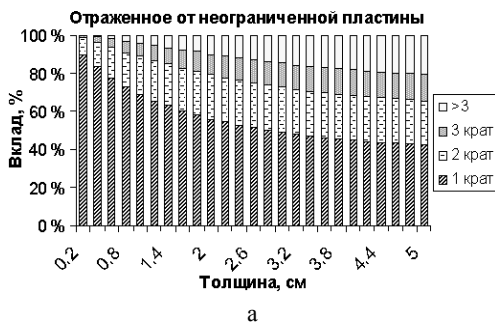


Рис. 2. Зависимость процентных вкладов рассеяний разной кратности для: а – неограниченного по площади образца алюминия; б – образца алюминия 30 × 30 мм

Результаты расчетов, приведенные в табл. 1, показывают, что для образцов конечной толщины доля однократно рассеянных фотонов в отраженном излучении существенно возрастает (от ~40 до ~90 %), при этом общее количество отраженных фотонов уменьшается в 5–10 раз в зависимости от учета рассеяний разной кратности.

Таблица 1

Вклады рассеяний разной кратности для алюминия, %

Число рассеяний	Неогр. по $x, y, z$	Неогр. по $x$ и $y$ , $t = 2$ мм		30 × 30 × 2 мм	
		Отраж.	Прошед.	Отраж.	Прошед.
1	39,29	89,76	93,44	90,93	93,95
2	21,96	8,77	5,79	8,21	5,39
3	13,83	1,19	0,56	0,65	0,30
>3	24,92	0,28	0,21	0,21	0,36

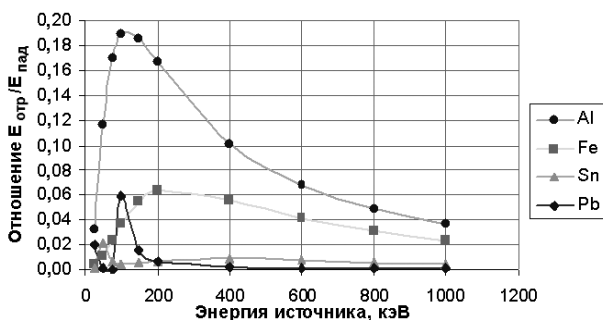


Рис. 3. Зависимость доли потока отраженной энергии от начальной энергии источника для Al, Fe, Sn, Pb

Также были исследованы альбедо и потоки энергии отраженного излучения для разных материалов и энергий источника. Показано (рис. 3), что наибольший поток энергии и количество фотонов в отраженном из-

лучении наблюдаются при энергии падающих квантов 100–300 кэВ. Среди исследованных веществ максимальные потоки отраженного излучения получены для алюминия. Из рис. 3 видно, что доля отраженной энергии для алюминия составляет 19 % при энергии источника ~ 100 кэВ.

## 2. Размеры активной области альбедо

Отраженное излучение выходит из вещества в пределах некоей области, площадь и форма которой зависят от энергии, источника и геометрии задачи. Так, например, при нормальном падении первичного излучения активная область будет иметь форму круга. При наклонном падении излучения круг перейдет в эллипс. На рис. 4 приведены результаты расчетов доли потока отраженной энергии от радиуса этого круга для разных материалов при энергии источника 100–400 кэВ. Все зависимости имеют экспоненциальный характер.

Полученные зависимости позволяют оценить размеры коллиматоров, необходимые для детектирования излучения от различных материалов. Для исследованного диапазона материалов ( $Z = 13 \div 82$ ) размер коллиматора находится в диапазоне от ~ 10 см до ~ 1 мм. Чем тяжелее вещество и меньше энергия источника, тем меньше размер активного пятна.

Для выявления диапазонов, в которых распределены характерные размеры активных пятен, была дополнительно исследована зависимость потока отраженной энергии от размера детектора и коллиматора в диапазоне энергий 100–400 кэВ (см. рис. 4).

Для алюминия размеры детектируемой области сконцентрированы в одном порядке (20–110 мм), для железа и олова диапазон растянут на два порядка – от 3 до 100 мм и от 0,5 до 10 мм, соответственно. Для свинца же диапазон коллиматоров снова укладывается в один порядок 0,3–2 мм.

Таким образом, для элементов середины таблицы Менделеева размеры пятна сильно зависят от энергии первичных фотонов. Характерный размер пятна уменьшается на порядок при увеличении атомного номера вещества в ~ 2 раза (рис. 5).

## 3. Исследование слоистых (композиционных) структур

Объектом исследования являлась композиционная структура, состоящая из трех неограниченных по площади (координатам  $x, y$ ) слоев (см. табл. 2): верхний и нижний слой – из алюминия (9 мм) или железа (4 мм), средний слой толщиной 2 мм (прослойка) – воздух, свинец, алюминий или железо. Геометрия всех композиций была одинакова. Для воздуха брался средневзвешенный  $Z$  по смеси кислорода и азота.

В качестве анализируемых параметров выбраны поток отраженной энергии и размер пятна, откуда выходит 90 % отраженного излучения (см. табл. 2).

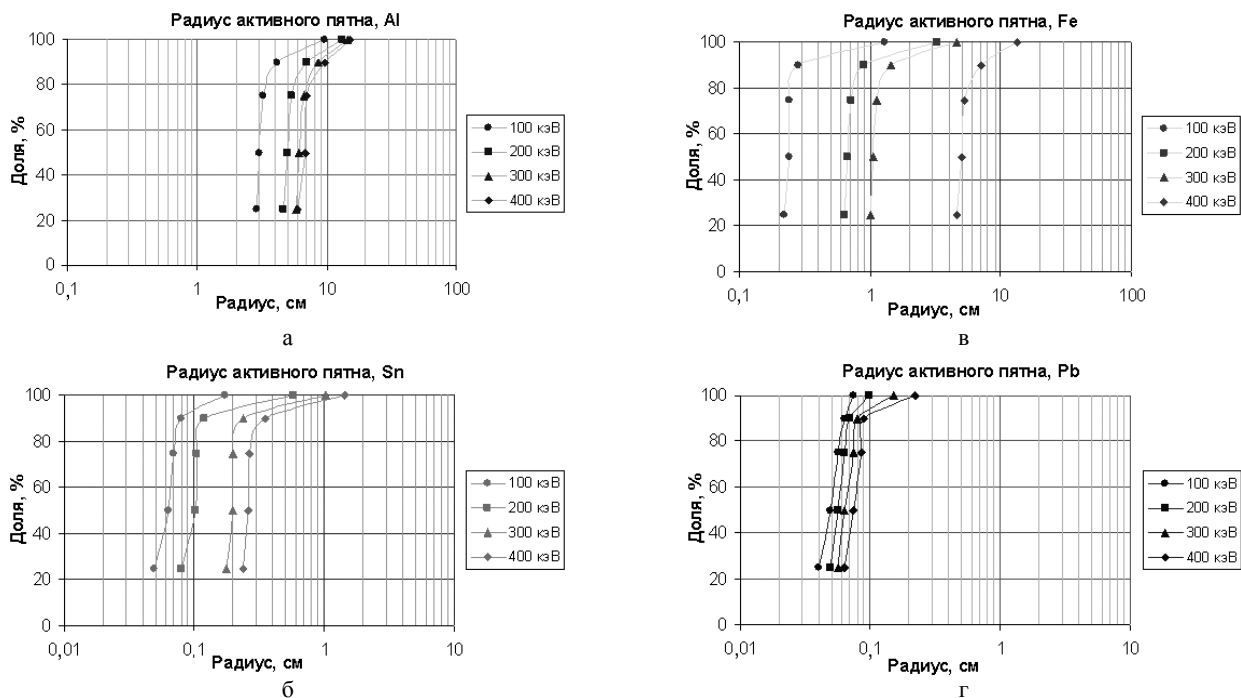


Рис. 4. Зависимости долей потока отраженной энергии от размеров детектируемого пятна для начальной энергии фотонов в диапазоне 100–400 кэВ

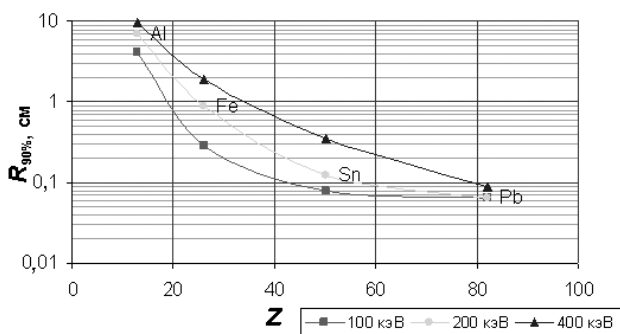
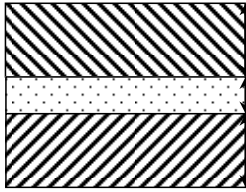
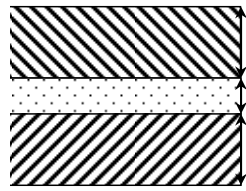


Рис. 5. Зависимость размера активного пятна, откуда излучается 90 % потока отраженной энергии, от атомного номера вещества

Таблица 2

Зависимость потока отраженной энергии и размеров пятна от состава композиции ( $E_{нач} = 200$  кэВ, статистика  $10^8$ )

Композиция	X	Поток энергии (альbedo), кэВ	$R_{90\%}$ , мм
 Al – 9 мм X – 2 мм Al – 9 мм	Воздух	1.74E+08	36,7
	Al	1.87E+08	35,2
	Fe	1.78E+08	27,2
	Pb	1.09E+08	19,8
 Fe – 4 мм X – 2 мм Fe – 4 мм	Воздух	1.12E+08	8,6
	Al	1.18E+08	8,7
	Fe	1.17E+08	7,8
	Pb	8.61E+07	5,2

Как можно видеть из табл. 2, для алюминия и железа наличие воздушного зазора привело к уширению пятна по сравнению со сплошным образцом материала. Данное явление вызвано разлетом фотонов в слабо поглощающей среде. Однако поток отраженной энергии уменьшается, так как отражение от воздуха мало ввиду его малой по сравнению с металлами плотности.

Ввод прослойки железа в структуру из алюминия приводит к уменьшению и потока отраженной энергии, и размеров пятна. Размещение же прослойки алюминия в железе приводит к незначительному изменению потока отраженной энергии (по сравнению с цельным куском железа), но при этом размеры пятна увеличиваются.

Наличие свинцовой вставки приводит к значительному уменьшению как потока отраженной энергии, так и размеров активного пятна для обоих случаев. То есть, происходит экранирование нижележащих слоев.

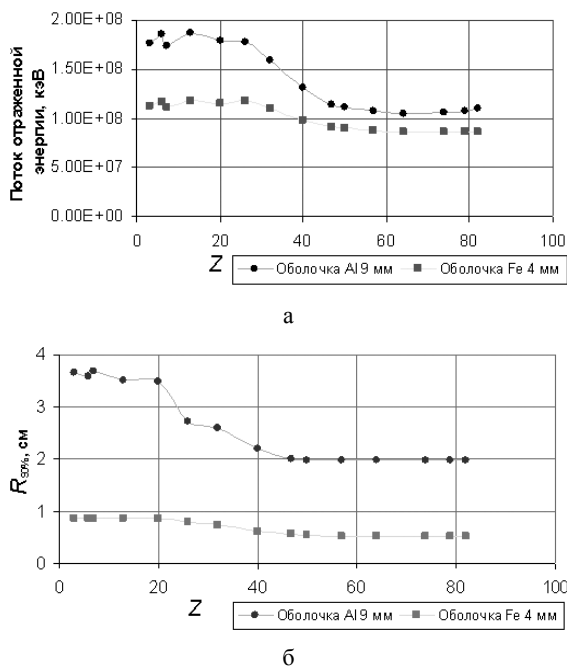


Рис. 6. Зависимость потока отраженной энергии (а) и размеров активного пятна (б) от  $Z$  образца прослойки ( $E_{нач} = 200$  кэВ, статистика  $10^8$ )

Более полно эти данные отражены на рис. 6. Данные охватывают вещества от лития ( $Z = 3$ ) до свинца ( $Z = 82$ ). Шаг по  $Z$  выбран в диапазоне примерно от 5 до 10. Видно, что зависимости имеют два уровня (легкие вещества до  $Z = 25$  и тяжелые с  $Z = 50$ ) и область перехода между ними. Размеры пятен для этих областей отличаются примерно в 2 раза. Так же наблюдаются небольшие осцилляции для легких веществ, вызванные колебаниями плотности, так как для некоторых твердых веществ с увеличением атомного номера может быть уменьшение плотности. Для воздушной прослойки присутствует некоторый провал по потоку энергии и уширение пятна.

Для прослоек из тяжелых веществ имеет место минимум исследуемых величин в районе  $Z = 64$  (гадолиний). Далее, при приближении к свинцу, наблюдает-

ся небольшой рост потока отраженной энергии, вызванный ростом энергии связи  $K$  оболочки и соответственно энергии характеристического излучения. Энергия становится достаточной для выхода этих фотонов. Размеры активного пятна при этом почти не меняются.

В данной постановке эксперимента зона наилучшего контраста по  $Z$  достигается в диапазоне от 20 до 50.

## Выводы

- Рассеяния кратности выше 5 дают незначительный вклад в поле отраженного излучения.
- С ростом энергии источника альbedo для всех исследованных материалов (Al, Fe, Sn, Pb) уменьшается.
- Альbedo и поток отраженной энергии максимальны для источников с энергией 100–300 кэВ (диапазон рентгеновского излучения).
- Наибольшая доля отраженной энергии 20 % (при облучении фотонами с энергией 100 кэВ) наблюдается для алюминия.
- С ростом энергии источника размер активного пятна  $R$  экспоненциально увеличивается, что вызвано ростом многократного рассеяния.
- При энергиях источника, близких к  $K$ -линии тяжелых элементов, в альbedo наблюдается резкое возрастание числа фотонов характеристического излучения.
- С ростом атомного номера материала размер активного пятна уменьшается от  $\sim 100$  мм (Al) до  $\sim 0,1$  мм (Pb).
- Наличие воздушной полости в образце приводит к уширению активного пятна альbedo и уменьшению потока отраженной энергии.
- Для образца из железа и прослойки из алюминия наблюдается незначительное изменение потока отраженной энергии (по сравнению с цельным куском железа), но при этом размеры пятна увеличиваются.
- Прослойка из тяжелого вещества (Pb) приводит к экранированию нижележащих слоев и уменьшению как потока отраженной энергии, так и размеров пятна.
- Наилучший контраст по  $Z$  достигается в диапазоне от 20 до 50.

## Список литературы

1. Булатов Б. П., Ефименко Б. А., Золотухин В. Г., Климанов В. А., Машкович В. П. Альbedo гамма-излучения. М.: Атомиздат, 1968.
2. Беляев В. Н., Ставцев А. Ю. Разработка методов одностороннего контроля внутренней структуры объектов по отраженному рентгеновскому излучению // Сборник научных трудов «Научная сессия МИФИ-2006». М.: МИФИ. 2006. Т. 5. С. 27–28.
3. Беляев В. Н., Ставцев А. Ю. Генераторы псевдослучайных чисел и их применимость для расчетов Монте-Карло в задачах обратного рассеяния рентгеновского излучения // Сборник аннотаций «4-й Курчатовской молодежной научной школы». М.: РНЦ «Курчатовский институт». 2006. С. 102.

Статья поступила в редакцию 21.10.2008.

<b>Горбатенко М. В., Горбатенко Т. М.</b> Дираковская частица в гравитационном поле . . . . .	3
<b>Вронский М. А., Карповцев Е. А., Попов Е. Ю.</b> Расчет кинетических коэффициентов плазмы с использованием самосогласованных потенциалов Хартри – Фока – Слэтера программы THERMOS . . . . .	11
<b>Морозов В. Г., Жогов Б. М., Савельев С. А., Титова В. Б.</b> Вихревая подсеточная модель для расчетов турбулентного перемешивания . . . . .	21
<b>Петров А. М.</b> Численное моделирование кинетики формирования частиц в системах с двухфазной дисперсной средой. Расчеты для эксперимента "Монтана" . . . . .	27
<b>Бабичев Н. Б., Лутиков И. В., Севастьянов А. А.</b> Нестационарная задача Милна с постоянным объемным источником нейтронов в полубесконечной инертной среде . . . . .	35
<b>Бабичев Н. Б., Морозов В. Г., Севастьянов А. А.</b> Приближенный метод определения спектра нейтронов и других характеристик в оптически толстых водородосодержащих системах . . . . .	39
<b>Бабичев Н. Б., Беженцев Б. В., Бондарев П. С.</b> Новые формулы для вычисления коэффициентов диффузии нейтронов . . . . .	44
<b>Ставцев А. Ю., Штоцкий Ю. В.</b> Обратное комптоновское рассеяние рентгеновского излучения в слоистых средах . . . . .	49

<b>Gorbatenko M. V., Gorbatenko T. M.</b> Dirac particle in a gravitational field . . . . .	3
<b>Vronsky M., Karpovtsev E., Popov E.</b> Calculation of Plasma Transport Coefficients using Self Consistent Hartree-Fock-Clater potentials . . . . .	11
<b>Morozov V. G., Zhogov B. M., Saveliev S. A., Titova V. B.</b> Turbulent subgrid model for turbulent mixing computations . . . . .	21
<b>Petrov A. M.</b> Modeling particle formation kinetics in for two-phase disperse systems. Computation of the precipitation formation processes in the conditions of the Montana experiment . . . . .	27
<b>Babichev N. B., Lutikov I. V., Sevastyanov A. A.</b> Non-Stationary Milne's Problem with a Constant Volumetric Source of Neutrons in a Semi-Infinite Inert Medium . . . . .	35
<b>Babichev N. B., Morozov V. G., Sevastyanov A. A.</b> An Approximate Method to Determine Neutron Spectrum and Other Characteristics in Optically Thick Hydrogen-Containing Systems . . . . .	39
<b>Babichev N. B., Bezhencev B. V., Bondarev P. S.</b> New analytical formulae for calculating neutron diffusion constant . . . . .	44
<b>Stavtsev A. Yu. Shtotsky Y. V.</b> The Backward Compton Scattered X-Ray Radiation in the Layered Mediums . . . . .	49

Редактор Н. П. Мишкина

Корректор М. В. Кривова

Компьютерная подготовка оригинала-макета А. А. Ивлева

Подписано в печать 17.01.2009

Формат 60×84<sup>1</sup>/<sub>8</sub>

Офсетн. печ.

Усл. печ. л. 7,5

Уч.-изд. л. 8,4

Тираж 170 экз.

Зак. тип. 2176-2008

8 статей

Индекс 3657

Отпечатано в ИПК ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ"

607188, г. Саров Нижегородской обл.

## Вниманию читателей

В статье «Особенности пространственного распределения нейтронов вблизи границ» (авторы Н. Б. Бабичев, А. А. Севастьянов), опубликованной в ВАНТ, сер. Теоретическая и прикладная физика, 2008, вып. 2, в формулах (2), (3) на странице 32 допущена одна и та же опечатка в показателе экспоненты. Данные формулы следует читать:

$$n(\vec{r}) = \int \frac{d\vec{r}'}{4\pi S^2} \beta(\vec{r}') n(\vec{r}') \exp \left\{ - \int_{S_{\min}}^S dS' \left[ \frac{\lambda}{V} + \alpha(S') \right] \right\}. \quad (2)$$

$$n(\vec{r}) V = \int \frac{d\vec{r}'}{4\pi S^2} [\beta(\vec{r}') n(\vec{r}') V + Q(\vec{r}')] \exp \left\{ - \int_{S_{\min}}^S dS' \alpha(S') \right\}. \quad (3)$$



ISSN 0234-0763

**ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ**

С е р и я :

**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ПРИКЛАДНАЯ ФИЗИКА**

2008. Вып. 3. 1–54

## РЕФЕРАТЫ

УДК 539.1.01; 514.83

ДИРАКОВСКАЯ ЧАСТИЦА В ГРАВИТАЦИОННОМ ПОЛЕ / М. В. Горбатенко, Т. М. Горбатенко // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 3–10.

Рассматривается движение дираковской частицы в гравитационном поле, описываемом решением Керра. Доказывается, что эволюция волновой функции определяется эрмитовым гамильтонианом, если используется сопутствующая система отсчета.

УДК 533.9 ... 16

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПЛАЗМЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ САМОСОГЛАСОВАННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ХАРТРИ – ФОКА – СЛЭТЕРА ПРОГРАММЫ THERMOS / М. А. Вронский, Е. А. Карповцев, Е. Ю. Попов // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 11–20.

Приводятся формулы для вычисления методом Чепмена – Энскога коэффициентов электропроводности и теплопроводности в неидеальной плазме с использованием самосогласованного потенциала Хартри – Фока – Слэтера, вычисляемого программой THERMOS. Находится приближенное решение уравнения Больцмана для плотности электронной компоненты плазмы, в котором для части, соответствующей электронным столкновениям берется транспортное сечение, определяемое самосогласованным потенциалом Хартри – Фока – Слэтера. Приводятся результаты расчетов коэффициентов и их сравнение с результатами расчетов, полученных другими методами.

УДК 532.517.4

ВИХРЕВАЯ ПОДСЕТОЧНАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТОВ ТУРБУЛЕНТНОГО ПЕРЕМЕШИВАНИЯ / В. Г. Морозов, Б. М. Жогов, С. А. Савельев, В. Б. Титова // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 21–26.

Предлагается новая модель для двумерных расчетов перемешивания. Рассматривается перемешивание тяжелых струй, проникающих в легкую среду. Первичные струи рассчитываются прямым численным моделированием. Выводятся двумерные уравнения перемешивания струй в предположении, что оно происходит за счет возникающих поперечных вихрей (ось вращения которых перпендикулярна плоскости течения). Модель внедрена в двумерный газодинамический комплекс "Медуза". В статье приведены результаты тестового расчета модельного опыта Е. Е. Мешкова по обтеканию воздухом "тяжелого" угла.

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ФОРМИРОВАНИЯ ЧАСТИЦ В СИСТЕМАХ С ДВУХФАЗНОЙ ДИСПЕРСНОЙ СРЕДОЙ. РАСЧЕТЫ ДЛЯ ЭКСПЕРИМЕНТА "МОНТАНА"/ А. М. Петров // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 27–34.

Ранее были разработаны численные и теоретические модели кинетики формирования капель и ледяных частиц в смешанных облаках. Наряду с кинетическими уравнениями модель использует уравнения массового и теплового баланса, принимает во внимание разницу в скоростях конденсации пара над водой и льдом, использует реальные скорости конденсационного и коагуляционного роста, учитывает процессы спонтанного промерзания капель, описывает динамику фазового перехода.

На основе разработанной численной модели проведены расчеты для процессов формирования осадков в условиях эксперимента, проведенного в штате Монтана.

УДК 539.17

НЕСТАЦИОНАРНАЯ ЗАДАЧА МИЛНА С ПОСТОЯННЫМ ОБЪЕМНЫМ ИСТОЧНИКОМ НЕЙТРОНОВ В ПОЛУБЕСКОНЕЧНОЙ ИНЕРТНОЙ СРЕДЕ / Н. Б. Бабичев, И. В. Лутиков, А. А. Севастьянов // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 35–38.

Решен не рассматривавшийся ранее вариант задачи Милна с линейным по времени возрастанием равновесной нейтронной плотности.

УДК 539.17

ПРИБЛИЖЕННЫЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПЕКТРА НЕЙТРОНОВ И ДРУГИХ ХАРАКТЕРИСТИК В ОПТИЧЕСКИ ТОЛСТЫХ ВОДОРОДОСОДЕРЖАЩИХ СИСТЕМАХ / Н. Б. Бабичев, В. Г. Морозов, А. А. Севастьянов // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 39–43.

В случае однородных оптически толстых водородосодержащих систем с примесями делящихся веществ и поглотителей нейтронов найдены приближенные решения кинетического уравнения. Полученные теоретические результаты удовлетворительно согласуются с экспериментом и могут оказаться полезными для тестирования соответствующих математических методик численного решения спектрального уравнения переноса нейтронов в системах, в которых необходимо учитывать тепловое движение ядер водорода.

НОВЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ НЕЙТРОНОВ / Н. Б. Бабичев, Б. В. Беженцев, П. С. Бондарев // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 44–48.

Найдены приближенные аналитические решения трансцендентных уравнений, которые в асимптотической диффузионной теории решаются совместно с уравнением диффузии нейтронов. Полученные аналитические выражения оказались столь точными, что необходимость численного решения трансцендентных уравнений исчезла. В результате этого явную зависимость коэффициентов диффузии нейтронов от различных параметров удалось выразить аналитическими формулами, которые в рамках асимптотической теории не нуждаются в дальнейшем уточнении.

ОБРАТНОЕ КОМПТОНОВСКОЕ РАССЕЙЯНИЕ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В СЛОИСТЫХ СРЕДАХ / А. Ю. Ставцев, Ю. В. Штоцкий // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2008. Вып. 3. С. 49–53.

Исследованы вклады в поле прошедшего и отраженного излучения гамма-квантов с энергией 100–400 кэВ, претерпевших однократное и многократное рассеяние. Расчеты проводились методом Монте-Карло с использованием генератора псевдослучайных чисел Knuth's. Были рассмотрены случаи неограниченного по площади ( $x, y$ ) и ограниченного ( $30 \times 30$  мм) образцов из алюминия толщиной  $t$ . Для полубесконечной среды из алюминия, железа, олова и свинца получены зависимости альбедо, потока отраженной энергии и характерных размеров активного пятна отраженного излучения. Исследовано также влияние состава гетерогенной композиции на поток отраженной энергии и размеры активного пятна.

DIRAC PARTICLE IN A GRAVITATIONAL FIELD / M. V. Gorbatenko, T. M. Gorbatenko // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 3–10.

It is considered a motion of Dirac particle in a gravitational field described by Kerr solution. It is proved that an evolution of the particle wave function is determined by the Hermitian Hamiltonian if an accompanied frame is used.

CALCULATION OF PLASMA TRANSPORT COEFFICIENTS USING SELF CONSISTENT HARTREE-FOCK-SLATER POTENTIALS / M. Vronsky,

E. Karpovtsev, E. Popov // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 11–20.

Given here are the formulas for heat and electric conductivity coefficient calculation using Chapman-Enskog method for nonideal plasma with self-consistent Hartree-Fock-Slater potential calculated with THERMOS code. The approximate Boltzmann equation solution is defined for the density of plasma electronic component in which transport cross-section defined by self-consistent Hartree-Fock-Slater potential is taken for the second part corresponding to the electron collision. Given here are the results of coefficient calculations and their comparison with calculation results derived by other methods.

TURBULENT SUBGRID MODEL FOR TURBULENT MIXING COMPUTATIONS / V. G. Morozov, B. M. Zhogov, S. A. Saveliev, V. B. Titova // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 21–26.

Mixing of heavy jets penetrating a light medium is considered. Primary jets are computed by direct numerical simulations. 2D jet mixing equations are derived on the assumption that the mixing is produced due to lateral vortices. Its approximate solution gives the eddy drift velocity. Assuming that matter is dragged by eddies we obtain the following expression for the concentration transport velocity. Using this expression, we set up equations for the mass flux, mixing, energy flux and the momentum flux tensor produced by turbulence. These quantities are substituted into the gas dynamics equation for numerical computations. At that, mixing of two substances in one cell is computed in a simplified manner accounting for the exchange with neighbor cells. The model is implemented in the Meduza-P 2D gas dynamics code. Test computations of a flow around a "heavy" corner have shown quite a good agreement with experimental data.

MODELING PARTICLE FORMATION KINETICS IN FOR TWO-PHASE DISPERSE SYSTEMS. COMPUTATION OF THE PRECIPITATION FORMATION PROCESSES IN THE CONDITIONS OF THE MONTANA EXPERIMENT / A. M. Petrov // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 27–34.

Theoretical and computational models for droplet and ice particle formation kinetics in mixed clouds were developed earlier in [1–3]. Alongside kinetic equations, these models involve equations of mass and thermal balance, accounts for the difference in rates of vapor condensation above water and ice, uses actual condensation and coagulation growth rates, describes the phase transition dynamics.

The developed numerical model is used here for computation of the precipitation formation processes in the conditions of the Montana experiment of 07/19/1981 [4–5].

NON-STATIONARY MILNE'S PROBLEM WITH A CONSTANT VOLUMETRIC SOURCE OF NEUTRONS IN A SEMI-INFINITE INERT MEDIUM / N. B. Babichev, I. V. Lutikov, A. A. Sevastyanov // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 35–38.

A version of the Milne's Problem has been solved that had not been considered before, i.e. the formulation with equilibrium neutron density linearly growing with time.

AN APPROXIMATE METHOD TO DETERMINE NEUTRON SPECTRUM AND OTHER CHARACTERISTICS IN OPTICALLY THICK HYDROGEN-CONTAINING SYSTEMS / N. B. Babichev, V. G. Morozov, A. A. Sevastyanov // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 39–43.

Approximate solutions of the kinetic equation are found for homogeneous optically thick hydrogen-containing systems with admixtures of fissile materials and neutron absorbers. The theoretical results are in satisfactory agreement with experiments and can be useful for validation of mathematical techniques for solving neutron transport spectral equation in systems where thermal motion of hydrogen nuclei must be considered.

NEW ANALYTICAL FORMULAE FOR CALCULATING NEUTRON DIFFUSION CONSTANT / N. B. Babichev, B. V. Bezhencev, P. S. Bondarev // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 44–48.

Approximate analytical solutions have been found for transcendental equations that are solved within the asymptotic diffusion theory jointly with the neutron diffusion equation. These analytical solutions are very accurate, so solving the transcendent equations numerically is not required. As a result, neutron diffusion constant has been explicitly correlated as a function of various parameters through analytical formulae that need no further refinement within the asymptotic theory.

THE BACKWARD COMPTON SCATTERED X-RAY RADIATION IN THE LAYERED MEDIUMS / A. Yu. Stavtsev, Y. V. Shtotsky // VANT. Ser.: Theoret. i prikl. fizika. 2008. № 3. P. 49–53.

There were explored the contributions in the field of the transmitted and mirrored gamma-quantum with the energy of 100–400 keV, endured single and multiple scatter. The simulations were held by Monte-Carlo method, using the Knuth's random-number generator. There were examined cases of square unlimited ( $x, y$ ) and limited ( $30 \times 30$  mm) aluminum patterns of the thickness  $t$ . The dependences of the reflectance, reflected energy flux and typical active spot size were obtained for semi-infinite medium of aluminum, iron, tin and lead. There were also researched the influence of the heterogeneous composition structure on the reflected energy flux and the active spot size.

## ПРАВИЛА

### оформления рукописей, представляемых в сборники РФЯЦ-ВНИИЭФ

**Максимальный объем статьи, как правило, не должен превышать 15 стр.** Статьи большего объема могут быть приняты к рассмотрению только по рекомендации членов редколлегии сборника. Объем заказных статей согласовывается с редколлегией.

**Рукописи представляются в двух экземплярах, отпечатанных шрифтом Times New Roman высотой 12 пунктов,** межстрочный интервал – двойной, левое поле 3 см, на высококачественном принтере. Статья сопровождается дискетой 3,5' (zip100, zip250, cd-r/rw, USB Flash Drive) с электронным вариантом текста в редакторе Word for Windows версии 2003 (.doc). Порядок расположения текста в файле должен быть таким же, как в сборнике (УДК, название статьи, фамилии и инициалы авторов, аннотация, статья, список литературы, пронумерованные рисунки с подписями, пронумерованные и озаглавленные таблицы, название, фамилии авторов и аннотация статьи на английском языке). Название файла должно состоять из фамилии первого по списку автора и краткого названия статьи, например: В. Ф. Колесов, В. Х. Хоружий "Кинетика периодических каскадных бустеров в аспекте их быстродействия и безопасности" (Kolesov\_kine-tika\_periodich.doc). Аннотация (не более 600 знаков) должна быть изложена в индикативной форме.

**Файлы иллюстраций должны быть представлены отдельно** – в виде файлов, в формате TIFF (.TIF) или JPEG (.JPG) (максимальное качество) с разрешением не менее 250 точек на дюйм (dpi или ppi). Название файла иллюстрации должно включать фамилию первого автора и порядковый номер рисунка в статье, например: Dzyuba\_03.tif.

**Не допускается представлять иллюстрации, созданные с использованием внутренних инструментов Word.**

На последней странице текста (после списка литературы) следуют подписи всех авторов. В совместных работах с другими организациями следует указывать место работы каждого автора. На отдельных листах в обязательном порядке представить номера домашнего и служебных телефонов авторов.

При написании статьи следует использовать общепринятые термины, единицы измерения и условные обозначения. **Все употребляемые авторами обозначения должны быть определены при их первом появлении в тексте.**

При наборе статьи на компьютере все латинские обозначения физических величин ( $A, I, d, h$  и т. п.) набираются курсивом, греческие обозначения, названия функций ( $\sin, \cos, \exp$ ), химических элементов ( $H_2O, H_2C_5OH$ ) и единиц измерения (см, МВт/см<sup>2</sup>, с) – прямым (обычным) шрифтом. Символы ( $\Re, \Im, \otimes \in$  и т. п.) следует оговаривать на полях рукописи.

**Формулы создаются в виде целых математических выражений в формульном редакторе Word или редакторе Math Type 5.2** и нумеруются в круглых скобках: (2), литературные ссылки – в квадратных: [3]. Нумерация формул должна быть сплошной по статье (не по разделам), нумерация типа (2а), (2б) нежелательна.

**Библиографические ссылки** в списке литературы располагаются в той последовательности, в какой они упоминаются в тексте, и оформляются по следующим правилам:

Для книг: фамилия и инициалы автора(ов), название книги, далее место издания, издательство, год (для трудов конференций – город, страна, год). Например: Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1988. Или: Elton R. C. X-Ray Lasers. Boston: Academic Press, 1990.

Для статей в журнале, сборнике, газете: фамилия и инициалы автора(ов), название статьи, название журнала (сборника), год, том, номер (или номер выпуска), страницы. Например: Полякова А. Л., Васильев Б. М., Купенко И. Н. и др. Изменение зонной структуры полупроводников под давлением // Физика и техника полупроводников. 1976. Т. 9, № 11. С. 2356–2358. Или: Афанасьев А. М. Оптимизация распределения энерговыделения в реакторе с помощью «советов оператору» // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов. 1986. Вып. 2. С. 32–36. Или: Mezain I. H. Rolling circuit boards improves soldering // Electronics. 1977. Vol. 34, N 16. P. 193–198.

Для диссертаций и авторефератов диссертаций кроме фамилии автора и его инициалов следует указать название диссертации, степень, место защиты (город) и год, а для препринтов – название препринта, место издания, год и номер. Например: Горшкова Т. И. Термодинамические свойства и применение некоторых сплавов церия: Автореф. дис. ... канд. хим. наук. М., 1976.

Для патентной документации: вид патентного документа (А.с. или Пат.), его номер, название страны, выдавшей документ, индекс международной классификации изобретения, название издания, в котором опубликована формула изобретения, год и номер издания. Например: А.с. 100970 СССР, МКИ<sup>3</sup> В 25J 15/00. Устройство для захвата неориентированных деталей типа валов / В. С. Ваулин, В. Г. Кенайкин // Открытия. Изобретения. 1983. № 11.

При необходимости в заголовке библиографической ссылки на работу четырех и более авторов могут быть указаны имена всех авторов или первых трех с добавлением слов «и др.». В списке литературы инициалы должны стоять после фамилий.

Для исправления авторских и редакционных ошибок авторам предоставляется одна корректура. При этом помимо исправлений ошибок допускаются лишь незначительные изменения и дополнения. Корректура с подписями авторов должна быть возвращена в редакцию в кратчайший срок.

**Рукописи, в которых не соблюдены данные правила, возвращаются авторам без рассмотрения по существу.** Датой поступления в редакцию считается день нового получения рукописей.